

Ionenstrahlinduzierte Strukturmodifikationen in amorphem Germanium

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt dem Rat der Physikalisch-Astronomischen Fakultät
der Friedrich-Schiller-Universität Jena

von Diplom-Physiker Tobias Steinbach
geboren am 13.10.1982 in Erfurt

Gutachter:

1. Prof. Dr. Werner Wesch
Institut für Festkörperphysik
Friedrich-Schiller-Universität Jena
2. Prof. Dr. Wolfgang Bolse
Institut für Halbleiteroptik und Funktionelle Grenzflächen
Universität Stuttgart
3. Prof. Dr. Marika Schleberger
Fachbereich Physik
Universität Duisburg-Essen

Tag der Disputation: 03.05.2012

*Suche das Einfache
und misstraue ihm.*

Alfred North Whitehead
Philosoph (1861 - 1947)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Physikalische Grundlagen	6
2.1	Ion-Festkörper-Wechselwirkung	6
2.1.1	Energieverlust des Ions im Festkörper	6
2.1.2	Ionenreichweite	9
2.1.3	Kanalisationseffekt	10
2.2	Ionenstrahlinduzierte Materialmodifizierung	11
2.2.1	Niederenergetische Ionenbestrahlung	11
2.2.1.1	Deplazierung von Gitteratomen	11
2.2.1.2	Amorphisierung kristalliner Materialien	11
2.2.2	Hochenergetische Ionenbestrahlung	12
2.2.2.1	Energiedichte und Energietransfer	12
2.2.2.2	Energiedissipation	17
2.2.2.3	Konsequenzen des hohen elektronischen Energieeintrags für kristalline Materialien	19
2.2.2.4	Konsequenzen des hohen elektronischen Energieeintrags für amorphe Materialien	19
2.3	Germanium	28
2.3.1	Eigenschaften von Germanium	28
2.3.1.1	Kristallines Germanium: c-Ge	28
2.3.1.2	Amorphes Germanium: a-Ge	28
2.3.2	Ionenstrahlinduzierte Effekte in Germanium	29
2.3.2.1	Formierung von Defekten	29
2.3.2.2	Formierung von Hohlräumen	31
2.4	Ionenstrahlinduzierte Formierung von Hohlräumen in anderen Halbleitern	33

3	Experimente	36
3.1	Probenpräparation	36
3.2	Experimentelle Bedingungen	38
3.3	Analyseverfahren	40
3.4	Molekulardynamische Simulation	40
4	Ergebnisse	41
4.1	Niederenergetische Ionenbestrahlung	41
4.1.1	Ionenstrahlinduzierte Amorphisierung	41
4.1.1.1	Defektformierung und Amorphisierung	41
4.1.1.2	Volumenausdehnung infolge struktureller Dichteänderung	43
4.1.2	Ionenstrahlinduzierte Hohlraumformierung	44
4.1.2.1	Hohlraumformierung in Abhängigkeit von der Ionen- energie und dem Einfallswinkel	44
4.1.2.2	Hohlraumformierung in Abhängigkeit von der Bestrah- lungstemperatur	56
4.1.2.3	Hohlraumformierung in Abhängigkeit von der Ionenart	60
4.2	Hochenergetische Ionenbestrahlung	68
4.2.1	Vorbetrachtungen	68
4.2.2	Ionenstrahlinduzierte Hohlraumbildung	69
4.2.2.1	SHI-Bestrahlung bei Raumtemperatur	69
4.2.2.2	SHI-Bestrahlung bei Tieftemperatur	73
4.2.2.3	Ergebnisse der molekulardynamischen Simulation . . .	75
4.2.3	Ionenstrahlinduzierte plastische Deformation	79
5	Diskussion	81
5.1	Ionenstrahlinduzierte Hohlraumbildung	81
5.1.1	Nukleare Energiedeponierung (LEI-Bestrahlung)	81
5.1.1.1	Energetisch bevorzugte Vakanzagglomeration	81
5.1.1.2	Hohlraumformierung an der Probenoberfläche	84
5.1.1.3	Hohlraumformierung im Bereich der projizierten Ionen- reichweite	84
5.1.1.4	Hohlraumformierung bei tiefen Temperaturen	85
5.1.2	Elektronische Energiedeponierung (SHI-Bestrahlung)	86
5.1.2.1	Schwellwert der elektronischen Energiedeponierung . .	86
5.1.2.2	Hohlraumformierung im Ge-Substrat	88
5.1.2.3	Hohlraumformierung infolge einer Schockwelle	89

5.2	Ionenstrahlinduzierte anisotrope plastische Deformation	91
5.2.1	Elektronische Energiedeponierung (SHI-Bestrahlung)	91
5.2.1.1	Beschreibung der Oberflächenverschiebung	91
5.2.1.2	Charakterisierung der Deformationsausbeute	92
5.2.1.3	Interpretation der positiven Deformationsausbeute	93
5.2.2	Nukleare Energiedeponierung (LEI-Bestrahlung)	94
5.2.2.1	Ionenstrahlinduzierte Deformation am Randbereich	94
5.2.2.2	Interpretation der winkelabhängigen Strukturmodifikation an der Probenoberfläche	98
6	Zusammenfassung	99
	Literaturverzeichnis	A
	Abbildungsverzeichnis	K
	Tabellenverzeichnis	M
	Abkürzungsverzeichnis	N
	Symbolverzeichnis	O
	Anhang	Q
A.1	Experimentelle Bedingungen	Q
A.2	Analyseverfahren	R
A.3	Molekulardynamische Simulation	T
	Danksagung	U
	Ehrenwörtliche Erklärung	W

Kapitel 1

Einleitung

Die anwendungsorientierte Modifikation der physikalischen und chemischen Festkörpereigenschaften durch die vielfältig einsetzbare Technologie der Ionenbestrahlung wurde seit ihrem Beginn in den 60er Jahren in der Materialforschung stetig weiterentwickelt und ist in einer technologisch hochentwickelten Gesellschaft, die immer weiter in die Welt der Mikro- und Nanostrukturen vordringt, nicht mehr zu ersetzen. Die in der modernen Bauelementetechnologie etablierte konventionelle niederenergetische Ionenbestrahlung nutzt das präzise Einbringen von Fremdatomen (Dotierung) aus, das sich durch hohe Genauigkeit, Homogenität und Reproduzierbarkeit des Dotiervorgangs sowie die relativ freie Wahl des Dotierprofils auszeichnet [1–3]. Zudem bietet sich die Möglichkeit der Dotierung durch dünne passivierende Oberflächenschichten [1], während in Verbindung mit gängigen Maskierungsverfahren qualitativ hochwertige Mikro- und Nanostrukturen zwei- oder sogar dreidimensional realisiert werden können [1, 4–6]. Nachteilig auf die gewünschten physikalischen Eigenschaften wirkt sich die Ionenstrahl-induzierte Erzeugung von Strahlenschäden aus, die durch geeignete Nachfolgebehandlungen behoben werden müssen [1]. Hochfluenzimplantationen resultieren im Allgemeinen in einer kompletten Zerstörung der Kristallstruktur (Amorphisierung) sowie in einer Veränderung der stöchiometrischen Zusammensetzung des Materials [1–3], was eine weitere Modifizierung der chemischen, mechanischen, magnetischen und optischen Festkörpereigenschaften ermöglicht. Beispiele hierfür sind die Herstellung supraleitender Verbindungen [1, 7], Oberflächenveredelung und -härtung [8] oder die Herstellung von Wellenleitern, Modulatoren und photonischen Kristallen [1, 5, 6]. Die Verwendung hochenergetischer Schwerionenbestrahlung zur definierten Modifikation struktureller und physikalischer Festkörpereigenschaften wird technologisch erst in Ansätzen genutzt [9–18], erfährt aber infolge zunehmender Untersuchungen zur Auswirkung von hoher elektronischer Energiedeponierung auf die im atomaren System induzierten Phasentransformationen und -übergänge zunehmend an Bedeutung. Oberhalb eines materialspezifischen Schwellwertes der Energiedeponierung resultiert der hohe elektronische Energieeintrag in kristallinen Materialien in einer Amorphisierung des Materials ent-

lang der Ionenflugbahn [19–24] und bewirkt in amorphen Materialien eine von der Bestrahlungstemperatur abhängige, nichtsättigende anisotrope plastische Deformation [17, 18, 25–39]. Das erfolgreichste Modell zur Beschreibung der beobachteten plastischen Deformation in konventionellen metallischen und dielektrischen Gläsern stellt das von Trinkaus vorgeschlagene viskoelastische Modell dar [40–45]. In der Trinkaus-Theorie wird die plastische Deformation durch die Relaxation induzierter Scherspannungen in jeder niederviskosen Ionenspur über viskoses Fließen beschrieben und auf die dabei entstehenden lokalen Deformationen (Relaxationsdehnung) zurückgeführt. Hedler et al. haben die Erweiterung des Modells auf amorphe Halbleiter (Silizium) gezeigt, wobei die experimentellen Ergebnisse nicht mit dem postulierten Flüssig-Fest-Phasenübergang 1. Art, sondern durch einen Flüssig-Flüssig-Phasenübergang gefolgt von einem Glasübergang erklärt werden konnten [36, 38].

In dem technologisch interessanten Halbleiter Germanium wird für Hochfluenzbestrahlungen sowohl bei nieder- [46–56] als auch bei hochenergetischen Ionen [57, 58] von einer weiteren extremen Strukturänderung berichtet. Abhängig von den Bestrahlungsbedingungen ist eine Formierung von Hohlräumen und eine Bildung von ausgedehnten, porösen Schichten zu beobachten, für deren Entstehung sowohl die nukleare als auch die elektronische Energiedeposition eine entscheidende Rolle spielt [57]. Diese ionenstrahlinduzierte Strukturmodifikation stellt einen bisher unverstandenen Effekt dar, besitzt jedoch ein enormes Potential für neuartige Anwendungen [59, 60], da sich die Eigenschaften von porösen Halbleitern wesentlich von ihrer kompakten kristallinen und amorphen Phase unterscheiden. Erste Anwendungen von mikro- und nanoporösen Halbleitern existieren, bedingt durch ihre deutlich veränderten elektrischen und thermischen Leitfähigkeiten sowie der enorm vergrößerten Oberfläche, in Form von Isolierschichten [59], bei der Detektion und Speicherung von Gasen [61, 62] sowie als Filterelemente [59]. Von aktuellem technologischen Interesse sind mögliche Anwendungen als Brennstoffzellen [63], photonische Kristalle, optische Filter und Spiegel sowie nichtlineare optische [64] und photovoltaische Bauelemente [65]. In der vorliegenden Arbeit wird die ionenstrahlinduzierte Hohlraumbildung erstmals systematisch als Funktion der Bestrahlungsparameter untersucht und die zugrunde liegenden Prozesse abhängig vom dominierenden Energieeintrag ausführlich diskutiert. Zudem wird die ionenstrahlinduzierte plastische Deformation unter Schwerionenbestrahlung für Germanium charakterisiert, da sich dessen halbleitende, tetraedrische amorphe Phase ebenso wie Silizium strukturell stark von der metallischen, hochkoordinierten flüssigen Phase unterscheidet. Insbesondere wird der Frage nachgegangen, ob generell für kovalent, tetragonal gebundene Systeme ein Polymorphismus der flüssigen Phase existiert und eine Bestimmung der Deformationsausbeute im Rahmen des viskoelastischen Modells unter Berücksichtigung der Ergebnisse zur Hohlraumformierung erfolgen kann.

Kapitel 2

Physikalische Grundlagen

2.1 Ion-Festkörper-Wechselwirkung

Das grundlegende Verständnis der Ionen-Festkörper-Wechselwirkung ist essentiell für eine Vielzahl potentieller Anwendungen im Bereich der Materialforschung, Halbleitertechnologie und für die Ionenstrahlanalyse von Festkörpern. Ionisierte Atome der Ladung Q , die sich aus dem Produkt des Ionisierungsgrades q und der Elementarladung e ergibt, werden im elektrostatischen Feld proportional zu der angelegten Spannung U auf eine kinetische Energie $E = qeU$ beschleunigt [2]. Die auf diese Weise erzeugten energiereichen Teilchen erfahren beim Eindringen in einen Festkörper durch eine Vielzahl von Stoß- und Streuprozessen an den Festkörperatomen einen sukzessiven Energieverlust, so dass die Ionen nach einer bestimmten Weglänge im Festkörper komplett abgebremst werden [2]. Die Reichweite der Ionen hängt außer von ihrer kinetischen Energie im Wesentlichen von den Massen der am Wechselwirkungsprozess beteiligten Stoßpartner ab, was die Voraussetzung für das präzise Einbringen von Fremdatomen darstellt [1, 2]. Der Prozess der Ionenimplantation zeichnet sich durch hohe Genauigkeit, Homogenität und Reproduzierbarkeit aus und bietet somit die Möglichkeit die physikalischen und chemischen Festkörpereigenschaften gezielt lateral und vertikal zu modifizieren [1]. Allerdings kann, abhängig von den Wechselwirkungsprozessen, die Energiedeposition entlang der Ionenflugbahn im Festkörper zur Schädigung des Kristallgitters sowie zu Phasentransformationen und -übergängen führen, die sich im Allgemeinen nachteilig auf die zu modifizierende Festkörpereigenschaft auswirken [1]. Die für die vorliegende Arbeit relevanten Grundlagen der Ionenstrahlphysik werden im Folgenden diskutiert.

2.1.1 Energieverlust des Ions im Festkörper

Nach dem Eintritt des Ions in den Festkörper erfahren die Ionen (oder Cluster) einen Energieverlust, der im Wesentlichen auf elastischen Stößen mit elektronisch abgeschirm-

ten Atomen und unelastischen Stößen mit Atomen und Atomkernen basiert [1–3]. Bei der elastischen Streuung überwiegt die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Kernen der Stoßpartner und die Elektronen wirken lediglich abschirmend. Dieser Prozess wird als nuklearer Energieverlust bzw. als nuklearer Energieeintrag bezeichnet, wobei beide Stoßpartner ihren Zustand beibehalten, jedoch entsprechend der Impuls- und Energieerhaltung ihre Geschwindigkeit und Bewegungsrichtung ändern. Im Gegensatz dazu führt die inelastische Streuung an Elektronen zu einer Änderung des Elektronenzustandes mindestens eines Stoßpartners und wird als elektronischer Energieverlust bzw. Energieeintrag bezeichnet. Die inelastische Streuung an den Atomkernen resultiert in deren Anregung [1–3]. Jedoch sind die Wirkungsquerschnitte für Kernreaktionen selbst im effizienten Fall von energiereichen leichten Stoßpartnern sehr klein verglichen mit denen der nuklearen und elektronischen Streuung und können somit für die hier beschriebenen Experimente vernachlässigt werden.

Der Energieverlust eines Ions $dE < 0$ pro Weglänge dz , d.h. die Bremskraft, in einem Festkörper mit statistisch verteilten Atomen wird definiert durch die atomare Dichte des Festkörpers N_0 und den Bremsquerschnitt $\tilde{\varepsilon}(E)$:

$$\frac{dE}{dz} = -N_0 \tilde{\varepsilon}(E) \quad \text{mit} \quad \tilde{\varepsilon}(E) = \int T d\sigma(T, E), \quad (2.1)$$

wobei T als die im Einzelstoß übertragene Energie und $d\sigma(T, E)$ als Wirkungsquerschnitt bezeichnet werden [2]. Abhängig von der Energie E , der Masse M_I und der Ordnungszahl Z_I des Ions, sowie der Masse M_F und der Ordnungszahl Z_F der Festkörperatome dominiert die elastische Streuung, d.h. der nukleare Energieverlust dE_n mit dem Wirkungsquerschnitt $d\sigma_n$ bzw. Bremsquerschnitt $\tilde{\varepsilon}_n(E)$ oder die inelastische Streuung, d.h. der elektronische Energieverlust dE_e mit dem Wirkungsquerschnitt $d\sigma_e$ bzw. Bremsquerschnitt $\tilde{\varepsilon}_e(E)$. Im Allgemeinen wird angenommen, dass beide Prozesse statistisch unabhängig voneinander sind, so dass basierend auf Gleichung 2.1 gilt [1–3]:

$$d\sigma(T, E) = d\sigma_n(T, E) + d\sigma_e(T, E) \quad \rightarrow \quad \tilde{\varepsilon}(E) = \tilde{\varepsilon}_n(E) + \tilde{\varepsilon}_e(E). \quad (2.2)$$

Somit ergibt sich für einen aus i Elementen aufgebauten Festkörper ein Energieverlust pro Weglänge oder eine Bremskraft $\varepsilon(E) = \varepsilon_n(E) + \varepsilon_e(E)$ von [1–3]:

$$\frac{dE}{dz} = -\varepsilon(E) = -\sum_i N_0^i [\tilde{\varepsilon}_n^i(E) + \tilde{\varepsilon}_e^i(E)], \quad (2.3)$$

wobei die Additivität der Bremsquerschnitte $\tilde{\varepsilon}^i(E)$ ausgenutzt wird, welche durch die Bragg-Regel $\tilde{\varepsilon}(E) = \sum_i c^i \cdot \tilde{\varepsilon}^i(E)$ mit der relativen Zusammensetzung des Festkörpers $c^i = N_0^i/N_0$ beschrieben werden kann [2].

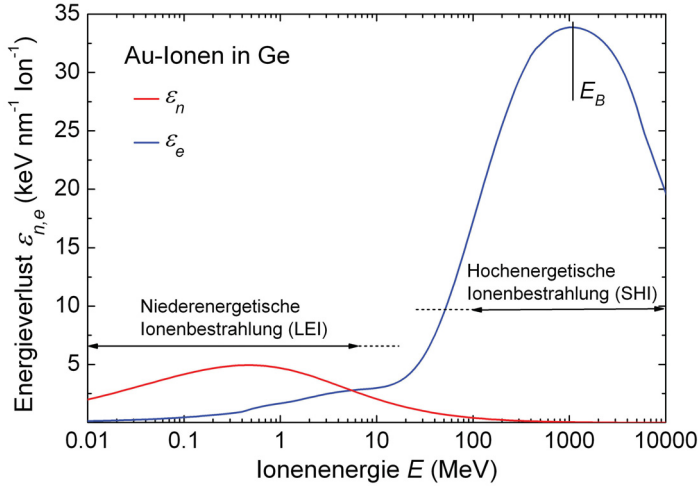


Abb. 2.1: Abhängigkeit des nuklearen ε_n und elektronischen ε_e Energieverlusts von der kinetischen Energie E des Ions. Die Daten wurden berechnet mittels der in dem Programm SRIM2008 tabellierten Werte [66, 67].

In Abbildung 2.1 ist am Beispiel von Au-Ionen in Ge der grundlegende Verlauf der Abhängigkeiten von $\varepsilon_n(E)$ und $\varepsilon_e(E)$ als Funktion der Projektilenergie dargestellt (SRIM, [66, 67]). Für den Energiebereich von einigen keV bis einigen MeV und großer Ionenmasse dominiert ε_n deutlich die Abbremsung des Ions, während für $E > 50$ MeV der elektronische Energieverlust, dessen Maximum im Allgemeinen im Bereich von $E \approx (100 \dots 4000)$ MeV liegt, die Abbremsung dominiert. Für die folgenden Betrachtungen werden diese beiden Energiebereiche auch als niederenergetische (LEI, Low Energy Ion) und hochenergetische Ionenbestrahlung (SHI, Swift Heavy Ion) bezeichnet.

Der **nukleare Energieverlust** $\varepsilon_n(E)$ kann laut Gleichung 2.1 unter Berücksichtigung des Wirkungsquerschnittes berechnet werden [2]. Dabei wird für die Streuung an den Kernen für $d\sigma_n(T_n, E)$ eine Näherungsformel angegeben [1], welche basierend auf einer universellen Streufunktion nach Lindhard, Scharff und Schiøtt die Eigenschaften der Stoßpartner einbezieht [68]. Die elastische Streuung zweier geladener Stoßpartner wird somit als klassisches Zweikörperproblem im Coulomb-Potential unter Berücksichtigung der elektronischen Abschirmung behandelt. Hierfür existieren eine Vielzahl vorgeschlagener Atompotentiale und Abschirmfunktionen basierend auf theoretischen Betrachtungen sowie auf Grundlage von semiempirischen Berechnungen. Die in der Literatur am häufigsten verwendeten Abschirmfunktionen zur Beschreibung des Atompotentials sind die Potentiale von Bohr [69], Thomas-Fermi [70], Molière [71], Lenz-Jensen [72, 73] sowie Ziegler-Biersack-Littmark [74], welche eine Universalabschirmfunktion aufgrund theoretisch berechneter Atompotentiale ermittelten. Wie in Abbildung 2.1 ersichtlich, wächst ε_n mit steigender Ionenenergie, da der Einfluss der elektronischen Abschirmung mit größer werdenden Geschwindigkeiten der Ionen effektiv abnimmt und damit die nuklearen Wechselwirkungskräfte zunehmen. Im mittleren Energiebereich weist ε_n ein Maximum auf, bis ε_n bei hohen Ionenenergien kontinuierlich abnimmt, da sich die Wechselwirkungszeit für große Teilchengeschwindigkeiten zunehmend verringert.

Wie in Abbildung 2.1 dargestellt, weist der **elektronische Energieverlust** ein Maximum um $E \approx M_I Z_I$ 80 keV u⁻¹ $\approx E_B$ auf und sinkt sowohl für $E < E_B$ als auch $E > E_B$, dem Gültigkeitsbereich der ersten Bornschen Näherung, kontinuierlich ab [1–3, 75]. Für den Energiebereich $E \ll E_B$ ergibt sich nach Lindhard, Scharff und Schiøtt [68] für den Energieverlust in einem freien Elektronengas mit einer Fermi-Geschwindigkeit $v_F \gg v_I$ der Ionen ein Anstieg in $\varepsilon_e(E)$ mit zunehmender Energie bzw. Ionengeschwindigkeit v_I gemäß $\varepsilon_e(E) \propto v_I \propto \sqrt{E}$ [2]. Dieser funktionelle Verlauf wurde durch die Erweiterung der Annahmen von Lindhard und Scharff für Festkörperlátome [76] sowie durch die unabhängigen Überlegungen von Firsov [2, 77] bestätigt. Für den Energiebereich $E > E_B$ zeigen die quantenmechanischen Betrachtungen von Bethe und Bloch mit wachsender Ionenenergie einen funktionalen Abfall von $\varepsilon_e(E) \propto E^{-1} (\ln E + \text{const.})$ [78, 79]. Der mittlere Energiebereich um das Maximum von ε_e wird häufig mittels einer Interpolationsformel nach Biersack beschrieben [80].

Für das Verhältnis der maximal durch nukleare und elektronische Energiedeponierung übertragbaren Energie T_{max} sowie für die jeweiligen Wirkungsquerschnitte $d\sigma$ ergibt sich [2]:

$$d\sigma_e/d\sigma_n \gg 1 \quad \text{und} \quad T_{max,e}/T_{max,n} \ll 1. \quad (2.4)$$

Der Wirkungsquerschnitt für die Energiedeponierung $d\sigma$ ist bei elektronischer Streuung wesentlich größer als bei nuklearer Streuung. Die dabei maximal auf einen einzelnen Stoßpartner übertragbare Energie T_{max} ist jedoch bei ε_e viel kleiner als bei ε_n , da bei ε_e die Masse des Stoßpartners, d.h. die Elektronenmasse m_e , deutlich geringer als die Ionenmasse ist ($m_e \ll M_I$). Darüber hinaus nimmt der Energietransfer bei nuklearem Energieeintrag mit größer werdendem Abstand der Stoßpartner, d.h. Stoßparameter, schneller als bei elektronischer Energiedeponierung ab [2].

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass sich mit steigender Ionenenergie die Wahrscheinlichkeit von nuklearen Stößen mit großen Streuwinkeln ($T \approx T_{max,n}$) substantiell verringert, so dass die Abbremsung der Ionen in diesem Energiebereich durch ε_e dominiert wird (vgl. Abb. 2.1).

2.1.2 Ionenreichweite

Die Weglänge des Ions im Festkörper R_I lässt sich durch die Integration von Gleichung 2.1 unter Kenntnis der Werte für $\varepsilon_{n,e}(E)$ berechnen. Da die dominierenden Streuprozesse statistisch ablaufen und somit R_I nicht der relevanten Größe der Tiefenverteilung der Ionen entspricht, wird die auf die Einfallsrichtung projizierte Weglänge R_p betrachtet [1–3]. Die Fremdatomverteilung $F_I(z)$ erreicht ihr Maximum bei R_p und kann für amorphe Festkörper und eine kleine Anzahl von eingeschossenen monoener-

getischen Ionen grob durch eine Gauß-Verteilung

$$F_I(z) = \frac{N_I}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \cdot \exp\left(\frac{-(z - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right) \quad (2.5)$$

approximiert werden, wobei der statistisch auftretende diskrete nukleare Energieverlust zu einer Verbreiterung ΔR_p von $F_I(z)$ führt [1–3]. N_I bezeichnet die Fluenz und entspricht dem Integral $N_I = \int F_I(z)dz$ und ist somit direkt proportional zur Anzahl der eingeschossenen Ionen pro Flächeneinheit.

Eine Möglichkeit zur Bestimmung der Fremdatomverteilung sowie der Energieverluste $\varepsilon_{n,e}(z)$ für amorphe Festkörper bietet die Monte-Carlo Computersimulation mit dem Programm SRIM2008 (Stopping and Range of Ions in Matter) [66, 67]. Zudem wird, ausgehend von $\varepsilon_n(z)$, die Anzahl deplazierter Gitteratome $N_{displ}(z)$ pro Ion und Weglänge sowie durch die Angabe einer Oberflächenbindungsenergie die Sputterraten für jedes Element berechnet. Bei den gesamten Berechnungen wird allerdings stets von amorphen Materialien ausgegangen, ohne Kristalleffekte zu berücksichtigen. Des Weiteren werden keine Änderungen der Topografie durch die Ionenbestrahlung oder, bei mehrkomponentigen Festkörpern, keine Änderungen in der stöchiometrischen Zusammensetzung an Grenzflächen durch das sogenannte Ionen-Mischen oder unterschiedliche Sputterraten der Festkörperatome während der Kalkulation einbezogen [66, 67].

2.1.3 Kanalisierungseffekt

Im Gegensatz zu strukturlosen amorphen Festkörpern sind bei Bestrahlung von Kristallen sowohl die Verteilung der implantierten Ionen als auch deren Energieverluste von der Einschussrichtung der Ionen abhängig [2, 81, 82]. Erfolgt der Einschuss entlang der Kristallachse oder -ebene, also in ausgezeichneter Richtung des Kristalls, werden die Ionen im periodischen Gitterpotential geführt. Dieser Effekt wird als Kanalisierung bezeichnet und wurde erstmals von Robinson und Oen berechnet [83, 84] und von Piercy et al. experimentell nachgewiesen [85]. Die Abbremsung der in den Kanälen geführten Ionen erfolgt dabei überwiegend durch den elektronischen Energieverlust ε_e . Verglichen mit der Bestrahlung in Zufallsrichtung, bei der der Kristall amorph erscheint, ist ε_e aufgrund der geringen Elektronendichte im Kanal im Mittel reduziert. Zudem erfahren die Ionen im Kanal nur elastische Stöße mit kleinen Ablenkungswinkeln, was verbunden mit dem reduzierten elektronischen Energieverlust zu einer erhöhten projizierten Reichweite führt [86, 87]. Der Kanalisierungseffekt kann für dicht gepackte Strukturen durch Ionenstreuung an den Atomreihen oder -ebenen beschrieben werden. Nach dem Kontinuummodell von Lindhard [88] kann die Streuung der Ionen an den einzelnen Festkörperatomen einer Atomreihe durch die Streuung an einem kontinuierlichen Potential angenähert werden. Daraus lässt sich in grober Näherung ein kritischer Win-

kel ψ , bis zu dem die Ionen durch Streuung im Kanal stabil geführt werden können, zu

$$\psi = \sqrt{\frac{2Z_I Z_F e^2}{4\pi\epsilon_0 E d_K}} \quad (2.6)$$

abschätzen, wobei d_K den Atomabstand entlang des Kanals und ϵ_0 die Dielektrizitätskonstante bezeichnen [1, 2, 81, 82, 88]. Thermische Effekte, deren Einfluss und Einbeziehung in das Modell werden in der Literatur diskutiert [81, 82].

2.2 Ionenstrahlinduzierte Materialmodifizierung

2.2.1 Niederenergetische Ionenbestrahlung

2.2.1.1 Deplazierung von Gitteratomen

Überschreitet beim elastischen Stoßprozess die auf das Festkörperatom übertragene Energie T dessen Versetzungsenergie E_d ($E_d \approx (14 \dots 16)$ eV für Ge [89–91]), wird das Atom von seinem Gitterplatz versetzt. Dies führt in kristallinen Festkörpern zu Strahlenschäden, d.h. es kommt abhängig von der verbleibenden Ionenenergie entweder zur Bildung einer substitutionellen Störstelle oder eines Frenkel-Defekts (Vakanz und Interstitial) [1, 2]. Bei einem ausreichend großen Energieübertrag $T \gg E_d$ können die versetzten Atome ihrerseits zusätzliche Atome deplazieren. Entlang der Bahn des Ions kommt es so zur Ausbildung von Stoßkaskaden. Die Größe und Dichte dieser Kaskaden sowie die dabei erzeugten primären und sekundären Defekte hängen von der Ion-Festkörper-Kombination, der kinetischen Energie E , der Fluenz N_I , der Proben temperatur T und einem möglichen Kanalisierungseffekt ab [1–3]. Der tiefenabhängige Verlauf der versetzten Atome $N_{displ}(z)$ kann mittels Computersimulationen (z.B. SRIM2008 [66, 67]) kalkuliert werden und unter Verwendung der Gleichung

$$n_{dpa}(z) = \frac{N_{displ}(z)N_I}{N_0} \quad (2.7)$$

in die Anzahl der Deplazierungen pro Gitteratom $n_{dpa}(z)$, die auch als normierte Fluenz bezeichnet wird, umgerechnet werden [2].

2.2.1.2 Amorphisierung kristalliner Materialien

Für die Ionenstrahlinduzierte Amorphisierung von Festkörpern werden bei niedrigen Proben temperaturen, bei denen thermische Ausheilprozesse vernachlässigt werden können, zwei Mechanismen diskutiert. Wie in Kapitel 2.2.1.1 beschrieben, führt die Ionenbestrahlung zur Bildung von einzelnen Defekten, welche mit zunehmender Bestrahlung akkumulieren, bis lokal eine kritische Defektdichte erreicht wird, bei der das Material

in die amorphe Phase kollabiert [92]. Andererseits kann es direkt zur Erzeugung von amorphen Bereichen durch ein einzelnes Ion kommen, wenn lokal in einer Stoßkaskade fast alle Atome eine kinetische Energie größer als die Schmelzenergie (*Wärmespitze*) besitzen [93] oder die Defektdichte (*Versetzungsspitze*) einen kritischen Wert überschreitet, der durch die elastischen Eigenschaften des Kristallgitters bestimmt ist [94]. Mit zunehmender Fluenz beginnen sich die amorphen Bereiche für beide Mechanismen zu überlappen, bis sich eine ausgedehnte amorphe Schicht bildet.

In dem Überlappungsmodell von Gibbons [92] wird angenommen, dass die durch ein Ion erzeugten Defekte in einem zylindrischen Bereich um die Ionenflugbahn vorliegen. Wie viele solche Zylinder sich überlagern müssen, um eine Amorphisierung des Materials zu erzielen, wird in dem Modell durch einen Überlappungsgrad m beschrieben. Dieser sinkt mit wachsendem nuklearen Energieeintrag. Für $m = 0$ bildet sich für jedes einzelne Ion ein amorpher Bereich entlang der Ionenflugbahn aus [92]. In dem Modell der Vakanz-Ausdiffusion nach Morehead und Crowder wird der Einfluss der Temperatur bzw. thermischer Diffusionsprozesse auf die Schädenbildung berücksichtigt [93]. Aus diesem Modell kann abgeleitet werden, dass sich im Kristall oberhalb einer kritischen Temperatur trotz hohem nuklearen Energieeintrag keine stabile amorphe Phase aufgrund von in-situ Ausheilungsprozessen bilden kann und der Kristall somit nahezu defektfrei bleibt [93]. Ein Modell, welches verschiedene Phasen der Schädenbildung bis hin zur Amorphisierung abhängig von der Temperatur und der Fluenz in zwei gekoppelten Differentialgleichungen beschreibt, wurde von Hecking et al. vorgestellt [95]. Es berücksichtigt beim Mechanismus der Schädigung neben direkter und stimulierter Amorphisierung auch die Produktion, Akkumulation sowie Rekombination von Punktdefekten und Defektclustern. Für viele Halbleiter, unter anderem auch Ge [96, 97], kann die Schädenbildung durch eine ungekoppelte Differentialgleichung charakterisiert werden [98]:

$$\frac{dn_a}{dN_I} = (P_a + G_a n_a)(1 - n_a). \quad (2.8)$$

In diesem vereinfachten Hecking-Modell beschreibt P_a den Querschnitt für die Erzeugung von Defekten bzw. amorphen Bereichen und G_a das stimulierte Wachstum von bereits existierenden amorphen Bereichen (n_a , relativer Anteil der Defekte) [95].

2.2.2 Hochenergetische Ionenbestrahlung

2.2.2.1 Energiedichte und Energietransfer

Das in den Festkörper eindringende Ion erfährt durch die dominierenden inelastischen Atomstöße im Energiebereich um $E \approx E_B$, d.h. es gilt $\varepsilon_e \gg \varepsilon_n$, keine signifikanten Richtungs- oder Geschwindigkeitsänderungen [2, 75] (für eine detaillierte Darstellung der im Folgenden beschriebenen physikalischen Prozesse siehe [21]). Für den Fall der Be-

strahlung mit energie- und massereichen Ionen (SHI-Bestrahlung) wird somit auf einer Länge von $\approx (10 \dots 30) \mu\text{m}$ in einem zylindrischen Bereich entlang der Ionenflugbahn (im Folgenden auch Ionenspur genannt) eine Energie von $\varepsilon_e \approx (10 \dots 40) \text{ keV nm}^{-1}$ in das Elektronensystem deponiert [21]. Die größte Energiedichte ist im Kernbereich der Spur lokalisiert, welcher nach Mozumder [99] definiert ist durch einen Radius R_K , der sich mittels der Ionengeschwindigkeit v_I und der Energiebandlücke E_g für nichtrelativistische Ionen zu $R_K \approx \hbar v_I / 2E_g = (1 \dots 5) \text{ nm}$ abschätzen lässt [21]. Innerhalb von $t = (10^{-19} \dots 10^{-17}) \text{ s}$ für Innerschalen-Anregung (Auger-Prozess) bzw. $t = 10^{-16} \text{ s}$ für kollektive Elektronenanregungen (Plasmonen) [75] führen lediglich $(30 \dots 40)\%$ von ε_e zu primären Anregungen und Ionisierungen der Festkörperatome [100]. Entlang ihrer Flugbahn bewirken die Ionen somit eine nahezu instantane elektronische Anregung aller Festkörperatome in einem lokal definierten Bereich um die Ionenspur. Die dabei befreiten Elektronen haben eine hohe kinetische Energie und es entsteht eine senkrecht zur Ionenflugbahn gerichtete elektronische Stoßkaskade [21]. Diese so genannten δ -Elektronen deponieren einen Großteil der in das Elektronensystem eingebrachten Energie weit entfernt vom Kernbereich der Ionenspur, wodurch dieser selbst temporär aus hoch ionisierten Festkörperatomen besteht [75]. Die gesamte elektronische Energiedichte im Kernbereich um die Ionenspur

$$\rho_{el} \approx \frac{\varepsilon_e}{2\pi R_K^2} \left(1 + \frac{1}{1 + 2\ln(R_p/R_K)} \right) \xrightarrow{R_p \gg R_K} \approx \frac{\varepsilon_e}{2\pi R_K^2} \quad (2.9)$$

beträgt nach Chatterjee und Schaefer ca. 50% von ε_e [101]. Der zylindrische Kernbereich um die Ionenspur besteht somit aus *kalten* ruhenden Gitteratomen und *heißen* Elektronen (Elektronen-Loch-Plasma [39]), wobei im Elektronensystem Temperaturen von $T_{el} \approx (10^4 \dots 10^5) \text{ K}$ vorliegen [75, 102, 103]. Die Thermalisierung der Elektronen setzt bei etwa 10^{-15} s ein und bewirkt ab 10^{-14} s die Energiedissipation im Elektronensystem sowie den Beginn des Energietransfers zu den noch in Ruhe befindlichen Gitteratomen [21]. Eine schematische Darstellung der zeitlichen Entwicklung der in das Elektronensystem deponierten Energie und induzierten atomaren Bewegung kann Abbildung 2.2 entnommen werden. Da experimentell an vielen, elektronisch und strukturell unterschiedlichen Materialien eine Schädenbildung entlang der Ionenspur nachgewiesen wurde, kann geschlussfolgert werden, dass der Mechanismus des Energietransfers nicht auf spezifischen Eigenschaften der elektronischen oder atomaren Struktur der Festkörper basiert [21]. Aktuell werden drei Mechanismen für die induzierte atomare Bewegung und die daraus resultierende Umordnung kontrovers diskutiert [21, 75]: die Coulomb-Explosion, das nichtthermische Schmelzen und die Elektronen-Phononen-Kopplung.

Nach Fleischer et al. wird in dem als ***Coulomb-Explosion*** bezeichneten schnellsten Mechanismus ein essentieller Anteil der in das Elektronensystem deponierten Energie

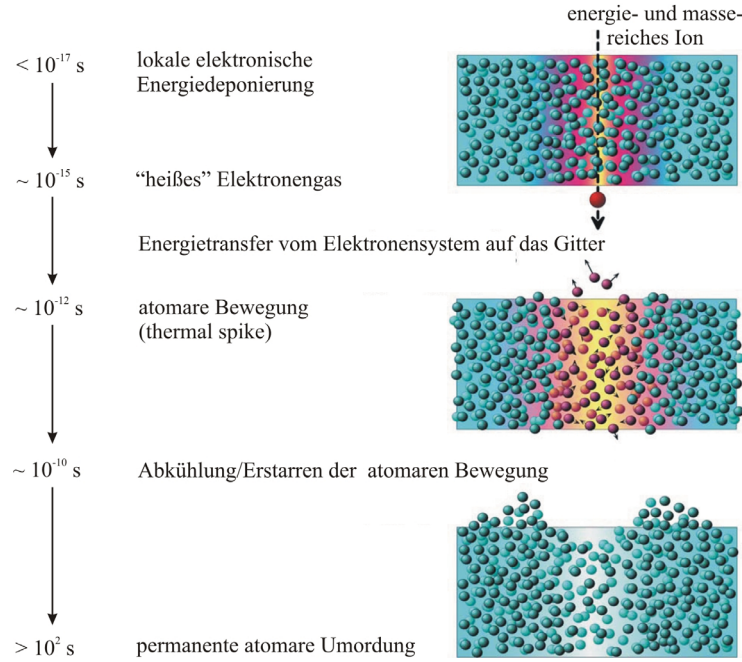


Abb. 2.2: Die elektronische Anregung und Ionisation der Festkörperatome entlang der Ionenspur führt zu einer atomaren Bewegung. Infolge schneller Abkühlungsraten können die dabei induzierten atomaren Umordnungen dauerhafte einfrieren [75].

durch elektrostatische Abstoßung der hoch ionisierten Festkörperatome im Kernbereich der Ionenspur in eine kollektive atomare Bewegung umgewandelt [104]. Dabei muss die induzierte mechanische Spannung infolge elektrostatischer Abstoßung der ionisierten Festkörperatome die mechanische Festigkeit, welche durch das Elastizitätsmodul E_{elas} bestimmt wird, übersteigen. Es muss gelten $(ne)^2/\varepsilon_0 a_0^4 > E_{elas}/10$, wobei n dem mittleren Ionisierungsgrad und a_0 dem mittleren atomaren Abstand entspricht [104]. Die Coulomb-Abstoßung basiert zudem auf der Voraussetzung, dass die hochenergetischen δ -Elektronen fernab der Ionenspur (z.B. in Farbzentren oder gebundenen Exzitonen) eingefangen werden, die Neutralisationszeit von 10^{-14} s und 10^{-13} s für leichte bzw. schwere Festkörperatome überschritten wird und somit keine schnelle Ladungsneutralisation der positiv geladenen Atome im Kernbereich der Ionenspur erfolgen kann [104]. Die Existenz elektrostatischer Potentiale um die Ionenspur auf einer fs-Zeitskala wurde erstmals mittels hochauflösender in-situ Elektronenspektroskopie durch die Energieschiebung von Auger-Elektronen nachgewiesen [75, 102, 103]. Zudem zeigten die Experimente, dass in allen untersuchten Materialien nach der abgeschlossenen Energiedeponierung entlang der Ionenflugbahn sehr hohe Temperaturen im Elektronensystem vorliegen, aber Ionenspurpotentiale und somit eine Coulomb-Explosion eher in Isolatoren als in metallischen Festkörpern mit ihren hohen Elektronenmobilitäten, d.h. schneller Ladungsneutralisation, zu erwarten sind [21, 39, 75, 102, 103]. Die theoretische Aussagekraft des Modells, z.B. die Vorhersage von Spurradien, ist stark eingeschränkt bzw. nicht möglich, aufgrund mangelnder qualitativer Kenntnisse zur Effizienz der Elek-

troneneinfangprozesse, die die Lebensdauer der elektrostatischen Potentiale und damit die Coulomb-Explosion maßgeblich bestimmen [21].

Der Prozess des *nichtthermischen Schmelzens* beschreibt eine kollektive atomare Umordnung auf einer sub-ps-Zeitskala, nachdem die Ladungsneutralität im Kernbereich der Ionenspur fast vollständig wiederhergestellt wurde [21]. Die interatomaren Potentiale sind unmittelbar nach der Ladungsneutralisation fern vom ihrem Gleichgewicht, da sich die Elektronen aufgrund langsamer Rekombinationsprozesse noch nicht in ihrem Grundzustand befinden. In Halbleitern und Isolatoren haben Valenzbandzustände einen bindenden und Leitungsbandzustände einen antibindenden Charakter. Nach Stampfli kann eine hohe Dichte an elektronischen Anregungen, wie sie im Kernbereich der Ionenspur vorliegt, überwiegend abstoßende oder antibindende Potentiale induzieren [105, 106]. Demnach werden kovalente Bindungen geschwächt und die entstandene strukturelle Instabilität resultiert in einer atomaren Umordnung. Tombrello postulierte wenig später auf Grundlage eines einfachen quantitativen Modells, dass Bindungen instabil werden, wenn die elektronische Energiedichte im Kernbereich der Ionenspur einen kritischen Wert überschreitet [107]. Für viele Materialien konnte mit diesem Modell eine gute Übereinstimmung zwischen experimentell bestimmten und kalkulierten Radien der geschädigten Kernbereiche um die Ionenspur erzielt werden [107].

Der in allen Materialien auftretende Mechanismus der *Elektronen-Phononen-Kopplung* erfolgt auf einer Zeitskala von $(10^{-13} \dots 10^{-12})$ s [108]. In dem Modell nach Toulemonde et al. [20, 108–111] und Meftah et al. [112, 113], welche auf den Arbeiten von Seitz und Koehler basieren [114], wird das Elektronensystem als quasifreies Elektronengas und das atomare System als kontinuierliches Medium betrachtet, wobei beide Systeme durch Elektronen-Phononen-Wechselwirkung gekoppelt sind. Zudem wird vorausgesetzt, dass die Energie, die in das Elektronensystem deponiert wurde, nach einer Zeit $\tau_{el} \approx 10^{-15}$ s thermalisiert. Die Entwicklung der beiden Systeme und der Energieübertrag vom Elektronensystem auf das Gitter werden durch zwei gekoppelte Wärmeleitungsgleichungen in zylindrischer Geometrie beschrieben [20, 108]:

$$C_{el}(T_{el}) \frac{\partial T_{el}}{\partial t} = \text{div} [\lambda_{el}(T_{el}) \text{grad } T_{el}] - g (T_{el} - T_p) + A(r, t) \quad (2.10)$$

$$\rho C_p(T_p) \frac{\partial T_p}{\partial t} = \text{div} [\lambda_p(T_p) \text{grad } T_p] - g (T_{el} - T_p), \quad (2.11)$$

wobei $T_{el,p}$ den Temperaturen, $C_{el,p}$ den spezifischen Wärmekapazitäten, $\lambda_{el,p}$ den Wärmeleitfähigkeiten im Elektronensystem ($_{el}$) bzw. Gitter ($_{p}$) sowie ρ der Massendichte im Gitter entsprechen. Der Parameter g beschreibt die Elektronen-Phononen-Kopplung und $A(r, t)$ ist die Energiedichte im Elektronensystem am Ort r und zur Zeit t , deren

zeitliches und flächenmäßiges Integral entsprechend der Energieerhaltung

$$2\pi \int_{t=0}^{\infty} \int_{r=0}^{\infty} A(r, t) r dr dt = \varepsilon_e \quad (2.12)$$

die gesamte im Elektronensystem deponierte Energie ε_e ergibt [20, 108]. Die thermodynamischen Materialgrößen des Gitters und des Elektronensystems sind für viele Materialien experimentell bestimmt bzw. lassen sich aus der Theorie des freien Elektronengases herleiten [39]. Der Energieaustausch zwischen Elektronen und Phononen in einem bestimmten Volumen kann über die Besetzungsänderung aller Phononenzustände beschrieben werden, wodurch sich für hohe Temperaturen des Elektronensystems ($T_{el} \gg T_D$, mit Debye-Temperatur T_D) die Kopplungskonstante g abhängig von der Schallgeschwindigkeit v_s und der mittleren Stoßzeit der quasifreien Elektronen (Anzahldichte n_e) mit den Gitteratomen τ_e für Metalle abschätzen lässt zu [115]:

$$g = \frac{\pi^2 m_e n_e v_s^2}{6\tau_e (T_e) T_e}. \quad (2.13)$$

Untersuchungen an Metallen mittels intensiven fs-Laserpulsen führen ebenfalls zu einer starken Elektronenanregung, die anschließend thermalisieren und durch Elektronen-Phononen-Wechselwirkung ihre Energie an das Gitter übertragen [116–119]. Aus einer Vielzahl von Bestrahlungen an Halbleitern mittels Hochleistungslasern ist bekannt, dass in diesen die Bandlücke verschwindet und ein metallisches Verhalten beobachtet wird, wenn, wie im Kernbereich um die Ionenspur anzutreffen, ungefähr 10% der Valenzelektronen in das Leitungsband angeregt werden [75, 120]. Nach Meftah et al. verhalten sich die heißen Elektronen im Leitungsband von nichtmetallischen Halbleitern wie die Elektronen in Metallen [121], so dass die thermodynamische Beschreibung des Energieübertrags (Gl. 2.10 und 2.11) für diese nichtmetallischen Materialien ebenfalls durch die in Gleichung 2.13 abgeschätzten Kopplungskonstanten erfolgen kann [24, 122].

Die Berechnung der Temperaturentwicklung auf mikroskopischer Skala basiert in dem vorgeschlagenen Modell auf makroskopischen Festkörpereigenschaften [39, 75, 109]. Die Wärmeleitungsgleichungen für das Elektronensystem und das Gitter setzen ein lokales thermodynamisches Gleichgewicht voraus, wobei im Allgemeinen ein hinreichend großer, d.h. viele Atome beinhaltender Bereich, mit mittlerer Phononenzahl betrachtet wird. Es ist unbekannt, ob die diffusive Beschreibung des Wärmetransports auf den Kernbereich um die Ionenspur mit einer zu erwartenden Ausdehnung um die freie Phononenweglänge verwendet werden kann und inwieweit die makroskopischen Eigenschaften unter solchen Bedingungen ihre Gültigkeit behalten [39, 75].

2.2.2.2 Energiedissipation

Die nach dem Energietransfer im atomaren Gitter einsetzende Energiedissipation in Form von atomarer Bewegung wird durch zwei grundlegend unterschiedliche Konzepte beschrieben und kann nach Klaumünzer wie folgt zusammengefasst werden [21]:

Nach Lesueur und Dunlop wird eine radiale kohärente Bewegung der gesamten Atome im Kernbereich der Ionenspur für den Prozess der Coulomb-Explosion angenommen [123]. Die lokal auftretende, instantane mechanische Belastung um die Ionenspur führt zu der Aussendung von Schockwellen [124]. Übersteigt die dabei induzierte Spannung einen kritischen materialspezifischen Grenzwert bis zu dem sich das Gitter elastisch verhalten würde, können dauerhafte atomare Umordnungen entstehen [124]. Zudem wird bei der Entspannung des Kernbereichs dieser selbst starken Vibrationen ausgesetzt, wodurch weiche niederfrequente Moden des Phononenspektrums im Atomgitter angeregt werden. Dies entspricht einer unkorrelierten Bewegung der Nachbaratome, die lokal Phasentransformationen bewirken können [123, 125]. Der Energieübertrag für die Versetzung eines einzelnen Festkörperatoms muss nicht die Deplazierungsenergie E_d überschreiten, da dies nur für ein Atom in einem perfekten Gitter im thermodynamischen Gleichgewicht gilt, nicht aber für kollektive Anregungen. Zudem konnte die in einigen Experimenten beobachtete Zerstäubung der Probenoberflächen [126, 127] mittels molekulardynamischer Computersimulation auf den Mechanismus der Coulomb-Explosion zurückgeführt werden.

Andererseits resultiert für hinreichend hohe elektronische Energieeinträge das Modell der Wärmespitze in einer radialen Temperaturverteilung um die Ionenbahn [109]. Die im Kernbereich der Ionenspur zu erwartenden hohen Temperaturen können abhängig von der Stärke der Kopplung zwischen beiden Systemen lokal die Schmelztemperatur des Festkörpers überschreiten und einen Phasenübergang im Bereich der Ionenspur induzieren [109]. Da aufgrund sehr hoher Abkühlungsraten von $(10^{-13} \dots 10^{-14}) \text{ K s}^{-1}$ das kurzzeitig verflüssigte Material oft nicht rekristallisieren kann, frieren die atomaren Umordnungen innerhalb von $(10^{-11} \dots 10^{-10}) \text{ s}$ verstärkt während des Erstarrens der flüssigen Phase permanent ein [21].

Eine grundlegende Vereinfachung des Wärmespitzenmodells erfolgte durch Szenes [19, 128–131]. Den Ausgangspunkt in diesem modifizierten Modell bildet eine hohe Energiedichte im Gitter um die Ionenspur zur Zeit $t = 0$. Das Modell erlaubt keine Aussage zum vorangegangenen Energietransfer vom Elektronensystem zum Gitter. Es wird ausschließlich das Gittersystem ab $t = 0$ betrachtet, wobei die Energiedissipation mit klassischer Thermodynamik beschrieben wird. Ausgehend von der zweidimensionalen Wärmeleitungsgleichung kann man eine gegenüber der Festkörpertemperatur T_0

erhöhte gaußförmige Temperaturverteilung um die Ionenbahn ableiten [19, 129–131]:

$$\Delta T(r, t) = T - T_0 = \frac{\tilde{g}\varepsilon_e}{\pi C_p \rho a^2(t)} \exp\left(-\frac{r^2}{a^2(t)}\right). \quad (2.14)$$

Dabei bezeichnet ρ die Dichte, C_p die spezifische Wärmekapazität, $a^2(t)$ die zeitabhängige Breite der Temperaturverteilung und \tilde{g} den Anteil von ε_e , der effektiv zur lokalen Temperaturerhöhung (Wärmespitze) beiträgt. Wie bereits beschrieben, erfolgt ein Phasenübergang bei Überschreitung einer charakteristischen Temperatur T_S , wofür nun ein Radius des fluiden zylindrischen Bereichs [19, 129–131]

$$R(t) = a(t) \sqrt{\ln \frac{\tilde{g}\varepsilon_e}{\pi C_p \rho a^2(t)(T_S - T_0)}} \quad (2.15)$$

abgeschätzt werden kann, in dem nach dem Erstarren der flüssigen Phase strukturelle Defekte verbleiben. Der in vielen Experimenten (z.B. [19–21, 24]) beschriebene materialspezifische Schwellwert-Effekt, bei dem erst oberhalb eines definierten elektronischen Energieeintrags ε_e^S permanente atomare Umordnungen zu beobachten sind, kann im Rahmen dieses Modells mit dem Überschreiten der Schmelztemperatur T_S und dadurch induzierten flüssigen Phase erklärt werden. Bei lokal konstanter Defektproduktionsdichte verhält sich die Anzahl von Defekten proportional zur maximalen Ausdehnung des fluiden Kernbereichs πR_{max}^2 [19, 20, 128]. Analog kann die Zerstäubung der Probenoberfläche in diesem Modell durch die Überschreitung der materialspezifischen Verdampfungstemperatur erklärt werden (z.B. [132]).

Über die Gültigkeit dieser vorgestellten, auf verschiedenen Annahmen beruhenden Konzepte wird derzeit kontrovers diskutiert [39, 75, 133], da aus bisherigen Untersuchungen keine exakten Rückschlüsse auf den Energietransfermechanismus der in das Elektronensystem deponierten Energie gewonnen werden können. Als Hauptkritikpunkt des Wärmespitzenmodells wird die Verwendung des klassischen Wärmetransportes bei einem Nichtgleichgewichtsprozess und die vernachlässigte Unterscheidung zwischen Elektronen und Löchern angeführt [39]. Andererseits kann für viele Materialien (Halbleiter und Metalle) die Coulomb-Explosion als alleiniger Mechanismus ausgeschlossen werden [39, 75]. Es ist vielmehr zu erwarten, dass alle vorgestellten Mechanismen (Coulomb-Explosion, nichtthermisches Schmelzen und Elektronen-Phononen-Kopplung; siehe Kap. 2.2.2.1) innerhalb ihrer Zeitskalen frühe und späte Entwicklungsstufen der Spurentstehung darstellen [21, 133].

2.2.2.3 Konsequenzen des hohen elektronischen Energieeintrags für kristalline Materialien

In vielen *kristallinen* Materialien (Isolatoren, Halbleitern und Metallen) ist eine kontinuierliche Amorphisierung entlang der Ionenspur oberhalb eines materialspezifischen Schwellwertes der elektronischen Energiedeponierung ε_e^S zu beobachten [19–21, 24].

Ionenstrahlinduzierte Spurbildung durch monoatomare Ionen wurde bei den Halbleitern InSb [24, 130], InP [23, 24, 122, 134], InAs [130] und GaSb [130] nachgewiesen. Experimente haben gezeigt, dass sich für eine Energiedeponierung von $\varepsilon_e \approx \varepsilon_e^S$ zunächst kugelförmige amorphe Gebiete entlang der Ionenbahn, sogenannte diskontinuierliche Ionenspuren, bilden, welche sich für $\varepsilon_e \geq \varepsilon_e^S$ über Ellipsoide zu kontinuierlichen zylindrischen amorphen Spuren bei $\varepsilon_e > \varepsilon_e^S$ zusammenschließen [24, 122, 134, 135]. Eine vollständige Bedeckung der Probenoberfläche mit diesen sich bei hohen Fluenzen überlagernden amorphen Ionenspuren führt zur Ausbildung einer ausgedehnten amorphen Oberflächenschicht bei einer kritischen Fluenz von $\approx 10^{12} \text{ cm}^{-2} \approx 1/(\pi R^2)$. Diskontinuierliche Ionenspuren sind auf Fluktuationen in der deponierten Energie entlang der Ionenflugbahn zurückzuführen und resultieren aus Änderungen des Ladungszustandes q des Ions, da $\varepsilon_e(E, q) \propto q^2$ gilt [136]. Die Reduktion der Schädenbildung bei Bestrahlung bei Flüssig-Stickstoff-Temperaturen wird im Rahmen des Wärmespitzenmodells auf die erhöhte Wärmeleitfähigkeit bei tiefen Temperaturen und somit auf eine effizientere Wärmedissipation zurückgeführt [122]. Zudem ist der Grad der Schädigung nicht nur vom absoluten Wert von $\varepsilon_e(E)$ abhängig, sondern auch von der Ionenenergie (Geschwindigkeitseffekt) [137, 138]. Bestrahlungen mit einer Energiedeponierung $\varepsilon_e < \varepsilon_e^S$ können indes eine oberflächennahe Ausheilung von leicht geschädigten Proben (Punktdefekte) aufgrund erhöhter Defektmobilitäten bewirken [139].

In Si, Ge, AlAs, GaAs und GaP wurde selbst für die höchsten durch monoatomare Ionen erreichbaren elektronischen Energieeinträge $\varepsilon_e(E_B)$ keine ionenstrahlinduzierte Spurbildung nachgewiesen [23, 140, 141]. Hochfluenz-Bestrahlungen an diesen Materialien resultieren in einer Defektkonzentration von wenigen Prozent, die auf die Erzeugung von Punktdefekten und kleinen Defektclustern aufgrund der geringen, aber nicht vernachlässigbaren nuklearen Energiedeponierung zurückzuführen ist [23].

2.2.2.4 Konsequenzen des hohen elektronischen Energieeintrags für amorphe Materialien

Unter hochenergetischer Ionenbestrahlung erfahren *amorphe* Materialien eine nicht-sättigende makroskopische plastische Deformation bzw. einen Spannungsaufbau, der 1983 zuerst von Klaumünzer an metallischen Gläsern beschrieben wurde [25]. In allen bisher untersuchten amorphen Materialien erfolgt die ionenstrahlinduzierte plastische

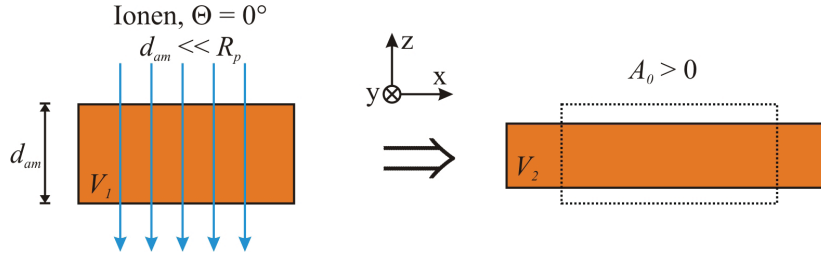


Abb. 2.3: Die senkrechte Bestrahlung einer freitragenden, dünnen amorphen Probe mit hochenergetischen schweren Ionen führt zu einer anisotropen plastischen Deformation (Ionen-Hämmerungseffekt) bei konstantem Volumen ($V_1 = V_2$). Für die Darstellung des anisotropen Wachstums wurde eine positive Deformationsausbeute $A_0 > 0$ für die Probe angenommen.

Deformation bei konstantem Volumen und ist durch eine positive Deformationsausbeute charakterisiert. Darüber hinaus wurde in allen Experimenten eine Verstärkung des Effekts für abnehmende Bestrahlungstemperaturen sowie höhere elektronische Energieeinträge nachgewiesen [17, 25–39, 142].

A) Ionen-Hämmerungseffekt

Die senkrechte Bestrahlung von dünnen amorphen Proben mit hochenergetischen schweren Ionen bewirkt eine laterale Vergrößerung der Probenebene senkrecht zur Ionenstrahlrichtung (x-y-Ebene), während sich die Probendicke gleichzeitig verkleinert (z-Richtung), so dass die Massendichte und folglich das Volumen sowie die mikroskopische Struktur der Probe unverändert bleiben [25–28]. Eine schematische Darstellung der unter senkrechter Bestrahlung beobachteten plastischen Deformation ist in Abbildung 2.3 dargestellt. Das ionenstrahlinduzierte anisotrope Wachstum der amorphen Materialien erscheint so, als ob diese aus der Einstrahlrichtung der Ionen von einem Hammer getroffen werden und ist in der Literatur als *Ionen-Hämmerungseffekt* bekannt [21, 37, 39]. Dünne Proben bedeuten in diesem Zusammenhang, dass die Probendicke sehr viel kleiner als die projizierte Ionenreichweite R_p ist und somit der Energieeintrag ε_e über die gesamte Ausdehnung der Probe als konstant angesehen werden kann. Unter diesen Voraussetzungen kann die eigentliche Wechselwirkung des Ions mit dem amorphen Substrat durch eine Deformationsausbeute pro Ion A_0 definiert werden [39]:

$$A_0(\varepsilon_e) = \frac{1}{l} \frac{\partial l}{\partial N_I}, \quad (2.16)$$

welche die makroskopische relative Änderung der Probenausdehnung l beschreibt. Experimente haben eine Abhängigkeit der Deformationsausbeute von der Bestrahlungstemperatur, dem Energieeintrag und dem Spannungszustand des Materials gezeigt [39]. A_0 ist bei tiefen Temperaturen maximal und sinkt deutlich, sobald thermisch aktivierte atomare Umordnungen möglich werden. Untersuchungen zeigen, dass für alle amorphen Materialien A_0 unterhalb eines materialspezifischen, von der Bestrahlungstemperatur

unabhängigen Schwellwertes $\varepsilon_e^{S_a}$ klein ist und nahezu exponentiell mit sinkendem Energieeintrag abnimmt. Oberhalb $\varepsilon_e^{S_a}$ weist die Deformationsausbeute einen linearen Anstieg auf [27, 36, 143]:

$$A_0(\varepsilon_e) = \zeta(\varepsilon_e - \varepsilon_e^{S_a}) \quad \rightarrow \quad \zeta = \frac{\partial A_0}{\partial \varepsilon_e}. \quad (2.17)$$

Wird die Probe zusätzlich tensilen Spannungen ausgesetzt, ist eine lineare Zunahme der Deformationsausbeute zu beobachten [39]. Zudem wurde von Audouard nachgewiesen, dass extern induzierte Scherspannungen von ungefähr 0.1 GPa die Deformationsausbeute messbar beeinflussen [143]. Die irreversible lokale Deformation ϵ_{lok} einer einzelnen Ionenspur mit Radius R kann mittels klassischer mesoskopischer Kontinuumsmechanik in Abhängigkeit von der Deformationsausbeute beschrieben werden [30]:

$$\epsilon_{lok} = \frac{A_0}{\pi R^2}. \quad (2.18)$$

Typische Deformationsausbeuten für Tieftemperaturbestrahlungen wurden zu $A_0 \approx (10^{-1} \dots 10^{-2}) \text{ nm}^2$ bestimmt und führen in einer Ionenspur mit Radius $R = 3 \text{ nm}$ zu lokalen Deformationen von $3 \times 10^{-3} \dots 5 \times 10^{-2}$ [39]. Unter der Annahme einer Deformationszeit von $\tau_D \approx 1 \text{ ps}$ werden lokal irreversible Scherraten zwischen $3 \times 10^9 \dots 3 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ erreicht. Die experimentell beobachteten Deformationen können eindeutig auf diese hohen Scherraten und deren induzierte Scherspannungen in der Größenordnung von 0.1 GPa zurückgeführt werden. Deformationen infolge von Schockwellen können ausgeschlossen werden, da die auftretenden Spannungen eine Größenordnung von 10 GPa überschreiten müssten, um eine solche plastische Deformation induzieren zu können [39].

Nach Klaumünzer und Gutzmann sind der Deformationszustand der Probe $\underline{\underline{\epsilon}}_p$ und die -rate $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_p$ linear abhängig von der Ionenfluenz N_I bzw. dem Ionenfluss Φ [17, 38]

$$\underline{\underline{\epsilon}}_p = \underline{\underline{A}}(N_I - N_{I_0}) \quad \rightarrow \quad \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_p = \underline{\underline{A}}\Phi \quad \text{mit} \quad \underline{\underline{A}} = A_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

wobei N_{I_0} einen Fluenzschwellwert bezeichnet und die Wechselwirkung eines einzelnen Ions A_0 sowie die anisotrope Deformation bei senkrechter Bestrahlung durch den Tensor $\underline{\underline{A}}$ charakterisiert sind. Die Spur des Tensors ergibt Null und garantiert die experimentell zu beobachtende Konstanz des Volumens bzw. der Dichte, $dV/V = Sp(\underline{\underline{\epsilon}}_p) = Sp(\underline{\underline{A}}) = 0$. Der Schwellwert N_{I_0} , unterhalb dem keine Deformation nachweisbar ist, wird einem stationären Zustand zugewiesen, der einer fast vollständigen Bedeckung der Probenoberfläche mit plastisch deformierten Gebieten entspricht $N_{I_0} \approx 10^{12} \text{ cm}^{-2} \approx 1/(\pi R^2)$ [26].

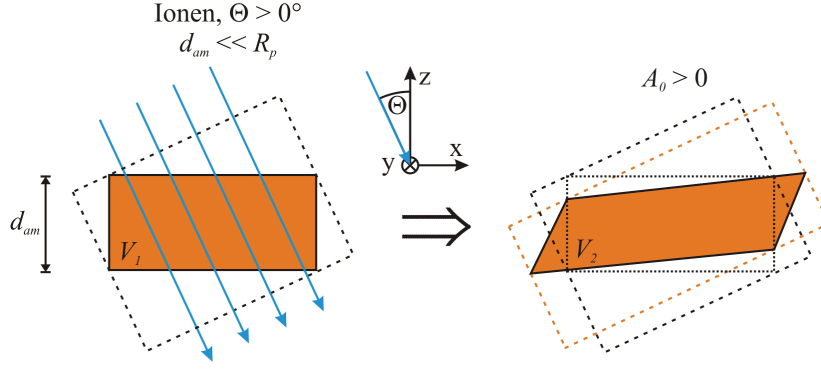


Abb. 2.4: Die Bestrahlung einer freitragenden dünnen amorphen Probe ($A_0 > 0$) mit hoch-energetischen schweren Ionen unter einem Winkel $\Theta > 0^\circ$ führt gegenüber der senkrechten Bestrahlung (gestrichelte Probe) zu einer makroskopischen Winkeländerung (ionenstrahlinduzierte Scherung) bei konstantem Volumen ($V_1 = V_2$).

B) Ionenstrahlinduzierte Scherung

Eine Ionenstrahlinduzierte Scherung kann bei Bestrahlungen der Probe unter schrägem Winkel Θ bezogen auf die Probennormale beobachtet werden (vgl. Abb. 2.4). Für die Beschreibung des Ionen-Hämmerungseffekts wird der Deformationstensor mittels einer Ähnlichkeitsabbildung mit der Drehmatrix D und der transponierten Drehmatrix D^T in die allgemeine winkelabhängige Darstellung transformiert [31]. Dabei kann die x-z-Ebene des Koordinatensystems der Probe als Einfallsebene des Ionenstrahls definiert werden (ohne Beschränkung der Allgemeinheit, siehe Abb. 2.4), so dass das Koordinatensystem der Ionenbahn um einen Winkel Θ um die y-Achse gedreht ist. Für den allgemeinen winkelabhängigen Deformationstensor $\underline{\underline{A}}(\Theta)$ folgt [17, 31, 38]:

$$\underline{\underline{A}}(\Theta) = D \cdot \underline{\underline{A}}(\Theta = 0^\circ) \cdot D^T = A_0 \begin{pmatrix} 1 - 3 \sin^2 \Theta & 0 & 3 \sin \Theta \cos \Theta \\ 0 & 1 & 0 \\ 3 \sin \Theta \cos \Theta & 0 & 1 - 3 \cos^2 \Theta \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Die nun auftretenden Nichtdiagonalelemente von $\underline{\underline{A}}$ führen zu Scherkomponenten im Deformationstensor $\underline{\underline{\epsilon}}_p$ (siehe Gl. 2.19) und erzeugen makroskopische Winkeländerungen in den amorphen Proben (vgl. Abb. 2.4) [31].

C) Plastisches Fließen

In dem in Abbildung 2.5 skizzierten Fall der senkrechten Bestrahlung einer dünnen amorphen Oberflächenschicht (vgl. Kap. 2.2.2.4, Abschnitt A) auf einem wesentlich dickeren inerten kristallinen Substrat (Dicke des Substrats \gg projizierte Ionenreichweite R_p) ist der Hämmerungseffekt aufgrund des sich nicht deformierenden Substrats mechanisch eingeschränkt. Experimente an freitragenden Proben mit diesem Schichtaufbau haben gezeigt, dass in der bestrahlten amorphen Schicht und in dem Substrat

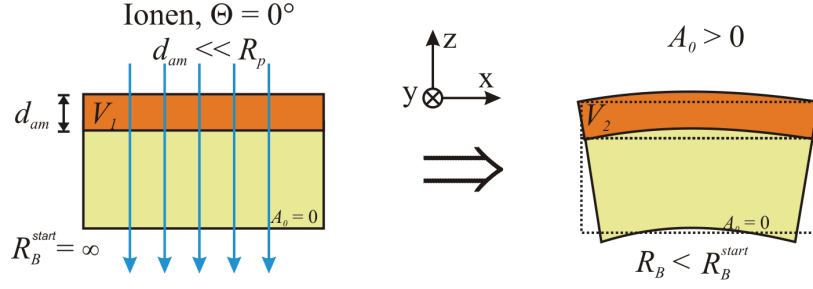


Abb. 2.5: Die senkrechte Bestrahlung einer freitragenden Probe, bestehend aus einer dünnen amorphen Oberflächenschicht ($A_0 > 0$) auf einem dicken inerten Substrat ($A_0 = 0$), bewirkt den Aufbau von Spannungen infolge des mechanisch eingeschränkten Ionen-Hämmerungseffekts, die zu einer Biegung der Probe (Biegeradius R_B) führen.

Spannungen $\underline{\underline{\sigma}}^S$ induziert werden, die eine Biegung der Probe bewirken [142–144]. Im Gegensatz zu extrem dünnen Proben führt die tiefenabhängige Energiedeponierung entlang der Ionenbahn $\varepsilon_e(z)$ bei hinreichend dicken amorphen Proben ebenfalls zur Erzeugung von Spannungen in der amorphen Schicht infolge der tiefenabhängigen Deformationsausbeute $A_0(\varepsilon_e(z))$ [142, 143, 145].

Zur vollständigen Beschreibung des Deformationszustandes der amorphen Schicht $\underline{\underline{\epsilon}}^S$ sind daher deren elastische und viskose Eigenschaften einzubeziehen. Nach Gutzmann und Klaumünzer ergibt sich die gesamte Deformationsrate der amorphen Schicht im Rahmen eines modifizierten Maxwell-Modells als lineare Überlagerung der einzelnen Komponenten [17, 33, 37–39]:

$$\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^S = \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^{elas} + \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^{vis} + \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^{ion} \quad (2.21)$$

$$\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^S = \frac{1}{2G} \frac{d}{dt} \left[\underline{\underline{\sigma}}^S - \frac{\nu}{\nu + 1} Sp(\underline{\underline{\sigma}}^S) \right] + \underline{\underline{k}}(\varepsilon_e(z)) \Phi \left[\underline{\underline{\sigma}}^S - \frac{Sp(\underline{\underline{\sigma}}^S)}{3} \underline{\underline{I}} \right] + \underline{\underline{A}} \Phi. \quad (2.22)$$

Der erste Term auf der rechten Seite der Gleichungen 2.21 und 2.22 charakterisiert den elastischen Anteil der Deformation und wird durch das Hooksche Gesetz beschrieben, in dem G das Schermodul und ν die Poisson-Zahl des amorphen Materials bezeichnen [17, 37]. Eine Relaxation der induzierten Spannung $\underline{\underline{\sigma}}^S$ erfolgt über viskoses Fließen. Die im Rahmen des Newtonschen Fließgesetzes bestimmte Deformationsrate $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^{vis}$ (2. Term) beschreibt das effektive Fließvermögen des Materials abhängig vom Ionenfluss Φ mittels eines von der lokalen Energiedeponierung abhängigen total-symmetrischen Fluiditätstensors 4. Stufe $\underline{\underline{k}}$ [33]. Meist wird $\underline{\underline{k}}$ zur Vereinfachung durch eine skalare Größe k_0 substituiert und eine isotrope Fluidität angenommen [33]. Der letzte Term beschreibt die in Gleichung 2.19 ermittelte, vom Ionenfluss abhängige Deformationsrate des Ionen-Hämmerungseffekts. Ohne Bestrahlung ist nach Gleichung 2.21 ein rein elastisches Verhalten der amorphen Schicht zu erwarten, d.h. $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^S(\Phi = 0) = \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^{elas}$ [17, 37, 39]. Ergänzt wird das modifizierte Maxwellmodell (Gl. 2.21) durch die Bewegungsgleichung [37, 39]

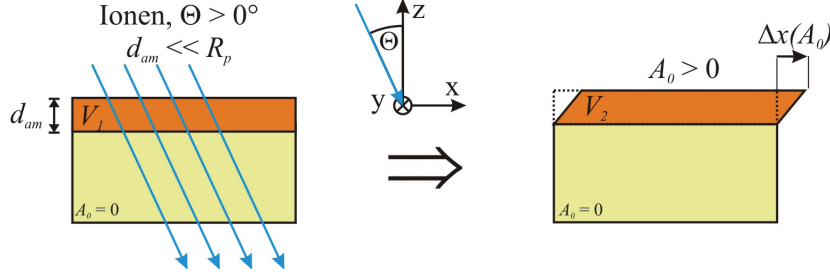


Abb. 2.6: Die Bestrahlung einer dünnen amorphen Oberflächenschicht ($A_0 > 0$) auf einem dicken inerten Substrat ($A_0 = 0$) mit hochenergetischen schweren Ionen unter einem Winkel $\Theta > 0^\circ$ führt, aufgrund der zusätzlich induzierten Scherkomponenten (vgl. Abb. 2.4), zu einem homogenen plastischen Fließen der amorphen Schicht auf dem inerten Substrat bei konstantem Volumen ($V_1 = V_2$).

$$\rho \frac{d\underline{v}}{dt} = \text{div } \underline{\underline{\sigma}}^S \quad \text{mit} \quad \dot{\epsilon}_{ij}^S = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad (2.23)$$

wobei ρ die Dichte des Materials und \underline{v} die Deformationsgeschwindigkeit, welche aus der Deformationsrate $\underline{\dot{\epsilon}}^S$ berechnet werden kann, bezeichnen. Aufgrund der geringen Deformationsgeschwindigkeiten $|\underline{v}|$ in der Größenordnung von nm/s nimmt die Bewegungsgleichung die Form eines quasi-statischen Gleichgewichts an, so dass gilt [37, 39]:

$$\text{div } \underline{\underline{\sigma}}^S = 0. \quad (2.24)$$

Für den Fall der schrägen Bestrahlung einer dünnen amorphen Oberflächenschicht der Dicke d_{am} auf einem dicken inerten Substrat (siehe Abb. 2.6) ergibt sich fern vom Randbereich der Probe als Lösung ein nichtsättigendes homogenes plastisches Fließen in Richtung der Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche. Die tiefenabhängige Schergeschwindigkeit $v(z)$ ergibt sich nach Gutzmann unter der Bedingung, dass in der amorphen Schicht der Energieeintrag ε_e konstant ist, zu [17, 33]:

$$v(z) = 3\Phi \sin(2\Theta) A_0(\varepsilon_e)(z + d_{am}). \quad (2.25)$$

Nach Gleichung 2.25 ist $v(z)$ für einen Einfallswinkel der Ionen von $\Theta = 45^\circ$ maximal und verschwindet bei senkrechter Bestrahlung. Zudem steigt mit abnehmender Entfernung zur Probenoberfläche die Schergeschwindigkeit linear von $v(z = -d_{am}) = 0$ am Übergang zum unterliegenden inerten Substrat auf einen maximalen Wert $v(z = 0) = 3\Phi d_{am} \sin(2\Theta) A_0(\varepsilon_e)$ an der Probenoberfläche an [17, 33]. Folglich ergibt sich für die amorphe Schicht eine tiefenabhängige Verschiebung $\Delta x(z)$ (siehe Abb. 2.6), die an der Probenoberfläche einen Maximalwert annimmt:

$$v_x(z = 0) \cdot t = \Delta x(z = 0) = 3N_I d_{am} \sin(2\Theta) A_0(\varepsilon_e) \quad \text{mit} \quad N_I = \Phi t. \quad (2.26)$$

Bei vernachlässigbarer Dehnung in z-Richtung, d.h. $v_z = 0$, folgt aus dem sich einstellenden Gleichgewicht zwischen Spannungsaufbau (mechanisch eingeschränkter Ionen-

Hämmerungseffekt) und Spannungsrelaxation (viskoses Fließen) ein stationärer Spannungszustand. Für die ionenstrahlinduzierten planaren Spannungen σ_{xx}^S und σ_{yy}^S ergeben sich abhängig von der Energiedeposition $\varepsilon_e(z)$ bei senkrechtem Ioneneinfall folgende Maximalwerte

$$\sigma_{xx}^S = \sigma_{yy}^S = -3 \frac{A_0(\varepsilon_e(z))}{k_0(\varepsilon_e(z))}, \quad (2.27)$$

wobei für alle weiteren Größen die Spannungskomponenten aus Gründen der Symmetriehaltung verschwinden $\sigma_{xy}^S = \sigma_{xz}^S = \sigma_{yz}^S = \sigma_{zz}^S = 0$ [33].

D) Viskoelastisches Modell: Effektive Fließtemperatur-Näherung

Die makroskopischen Effekte der plastischen Deformation können mit der Gleichung 2.21 erfolgreich beschrieben werden. Die mikroskopische Beschreibung geht auf Trinkaus und Ryazanov zurück, welche als erste versuchten, basierend auf den thermodynamischen Überlegungen des von Szenes vorgeschlagenen Wärmespitzenmodells (siehe Kap. 2.2.2.2), die physikalischen Abläufe in der flüssigen Phase mittels Kontinuumsmechanik zu verstehen [40, 41]. Das von Trinkaus weiterentwickelte viskoelastische Modell basiert auf der Relaxation von Scherspannungen innerhalb einer heißen niederviskosen Phase um die Ionenspur (siehe Abb. 2.7) [42–45]. Im Rahmen der vorgeschlagenen *Effektiven Fließtemperatur-Näherung* (EFT-Näherung) können die beobachteten Deformationen quantitativ gut beschrieben werden [45].

Die EFT-Näherung beschreibt die Energiedissipation über die klassische Wärmeleitungsgleichung, aus der eine Temperaturerhöhung um die Ionenbahn nach Gl. 2.14 abgeleitet werden kann [45]. Die resultierende thermische Ausdehnung des Kernbereichs um die Ionenspur ist mechanisch durch die umgebende Festkörpermatrix eingeschränkt, wodurch ein zylinderförmiges Spannungsfeld entsteht [38, 39]. Für Energieeinträge oberhalb des Schwellwertes für plastische Deformationen liegen im Kernbereich um die Ionenspur Temperaturen oberhalb einer *effektiven Fließtemperatur* T^* vor, bei der die Materie niederviskos wird. Aus der radialen Ausdehnung der viskosen Zone bestimmt durch die Bedingung $T = T^*$ folgt für die temperaturabhängige Scherviskosität $\eta_S(T)$ asymptotisch $\eta_S \rightarrow 0$ innerhalb der fluiden Zone ($T > T^*$) bzw. $\eta_S \rightarrow \infty$ für die Außenbereiche der Ionenspur mit $T < T^*$ [42–45]. Die Ausdehnung der niederviskosen Zone sowie deren zeitlicher Verlauf folgen aus Gleichung 2.15. Die Temperatur T^* kann im Fall der Bestrahlung von kristallinen Festkörpern der Schmelztemperatur T_S bzw. der Glastemperatur T_G im Fall amorpher Materialien zugeordnet werden.

Nach Trinkaus und Ryazanov lässt sich die heiße, niederviskose Ionenspur als thermoelastische Inklusion betrachten [40, 42–45]. Die fluide Zone erfährt eine effektive isotrope Eigendehnung $\epsilon^*(T)$ bedingt durch eine isotrope thermische Eigendehnung infolge der Temperaturerhöhung sowie durch eine isotrope Eigendehnung aufgrund induzierter

Dichteänderung. Basierend auf der Annahme, dass die radiale, periphere und axiale Eigendehnung nur durch die thermische Expansion $\epsilon_r^* = \epsilon_\varphi^* = \epsilon_z^* = \alpha^{th} \Delta T = \alpha^{th} (T - T_0)$ mit einem temperaturunabhängigen linearen Ausdehnungskoeffizienten α^{th} charakterisiert ist, folgt für die radialen, peripheren und axialen Spannungen $\sigma_{r,\varphi,z}$ in der niederviskosen Zone entsprechend der Eshelby Theorie [146] für elastische Inklusionen [21]:

$$\sigma_r = \sigma_\varphi = \frac{\sigma_z}{2} = -\frac{1+\nu}{1-\nu} G \alpha^{th} \Delta T. \quad (2.28)$$

In der EFT-Näherung verhält sich das System von Inklusion und umgebender Matrix vollkommen elastisch, solange die Temperatur T im Kernbereich um die Ionenspur unterhalb der Fließtemperatur T^* bleibt [40–45]. Für Temperaturen oberhalb T^* ist der Zustand einer niederviskosen flüssigen Phase in der Ionenspur mechanisch instabil, so dass alle thermisch induzierten oder extern verursachten Spannungen auf einer Zeitskala τ_S relaxieren. Die Relaxationszeit τ_S ergibt sich aus dem Quotienten der Scherviskosität η_S und dem Hochfrequenzschermodul der festen amorphen Phase G_∞ , $\tau_S = \eta_S / G_\infty$. Überschreitet die Lebensdauer der niederviskosen Zone t_{nv} die Relaxationszeit τ_S wird ein vollständiger Abbau aller Scherspannungen erreicht. Für zylinderförmige Inklusionen und unter der Randbedingung der Volumenerhaltung führt die Relaxation der Scherspannungen zu einem Zuwachs der Eigendehnungen ϵ_r^* , ϵ_φ^* und ϵ_z^* , die folgenden radialen, peripheren und axialen Relaxationsdehnungen entsprechen [41–45]:

$$\epsilon_r^* = \epsilon_\varphi^* = -\frac{\epsilon_z^*}{2} = \frac{1-\nu}{5-4\nu} \alpha^{th} \Delta T. \quad (2.29)$$

Infolge der schnellen Abkühlung der niederviskosen Zone steigt die Scherviskosität rapide an ($\eta_S \rightarrow \infty$), so dass der irreversible Anteil von ϵ^* an der Erstarrungsfront bei der Fließtemperatur T^* einfriert [41–45]. Um die Ionenbahn verbleibt eine permanente Relaxationsdehnung in radialer, peripherer und axialer Richtung. Die temperaturabhängigen Prozesse des anisotropen Wachstums sind in Abbildung 2.7 schematisch dargestellt. Für die jeweiligen Komponenten der makroskopisch beobachtbaren Deformationsraten des amorphen Materials gilt [21]:

$$\dot{\epsilon}_r^S = \epsilon_r^* \pi R_{max}^2 \Phi \quad \text{mit} \quad \dot{\epsilon}_r^S = \dot{\epsilon}_\varphi^S = -\frac{\dot{\epsilon}_z^S}{2}. \quad (2.30)$$

Unter Berücksichtigung von Gleichung 2.19 resultiert folgender Ausdruck für die Deformationsausbeute:

$$A_0 = \epsilon_r^* \pi R_{max}^2, \quad (2.31)$$

wodurch auch die in Gl. 2.18 eingeführte lokale Deformation ϵ_{lok} definiert wird, $\epsilon_{lok} = \epsilon_r^*$.

Nach Trinkaus und Ryazanov kann, unter Berücksichtigung einer realistischen gaußförmigen Temperaturverteilung in dem als zylinderförmig approximierten Kernbereich

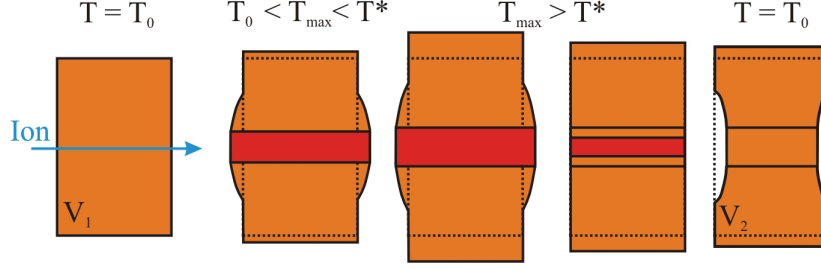


Abb. 2.7: Schematische Darstellung des anisotropen Wachstums in EFT-Näherung nach Trinkaus bei konstantem Volumen ($V_1 = V_2$): Energiedeponierung bei $T = T_0$, elastische Deformation infolge lokaler Temperaturerhöhung bei $T_0 < T_{max} < T^*$ (isotrope Eigendehnung), Relaxation der Scherspannungen über viskoses Fließen und Generation von Relaxationsdehnungen bei $T_{max} > T^*$ und permanent eingefrorene plastische Deformation bei $T = T_0$ [41–45].

mit maximaler radialer Ausdehnung R_{max} (siehe Gl. 2.15), für hohe Energieeinträge ein von der effektiven Fließtemperatur unabhängiger analytischer Ausdruck der Deformationsausbeute bestimmt werden [41, 43, 45]:

$$A_0(\varepsilon_e) = 1.16 \frac{1 + \nu}{5 - 4\nu} \frac{\alpha^{th} g \varepsilon_e}{e \rho C_p}. \quad (2.32)$$

Alle bisherigen an amorphen Materialien durchgeführten Experimente lassen sich mit der obigen Gleichung erfolgreich beschreiben, wobei für den unbekannten Parameter g , der den tatsächlichen Anteil von ε_e zur lokalen Wärmespitze charakterisiert, alle Werte im Bereich von 0.5 bis 1 liegen [39]. Bei der Bestrahlung von kristallinen Festkörpern wird argumentiert, dass zwar ebenfalls in der sich bildenden niederviskosen Zone eine Relaxation von Scherspannungen erfolgt, jedoch der anschließende Kristallisationsprozess zu einer Inversion der Relaxationsdehnungen und damit zu einer effektiv verschwindenden Deformationsausbeute $A_0 = 0$ führt [45].

Im Rahmen der EFT-Näherung lassen sich ebenfalls die aus Gl. 2.27 bekannten planaren Spannungszustände im Gleichgewicht analytisch ableiten zu [39, 42–45]:

$$\sigma_{\perp} = \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = -1.16 \frac{1 + \nu}{1 - \nu} G \alpha^{th} (T^* - T_0). \quad (2.33)$$

Die ionenstrahlinduzierten kompressiven Spannungen in hochenergiebestrahlten freitragenden amorphen Gläsern führen zu einer Biegung der Proben mit einem Biegeradius R_B (vgl. Abb. 2.5), der direkt proportional zu $R_B \propto 1/\sigma_{\perp}$ ist [147]. Die aus diesen Experimenten gewonnenen Sättigungsspannungen im stationären Zustand ermöglichen über die Gleichung 2.33 die Berechnung einer effektiven Fließtemperatur T^* [39]. Die Selbstkonsistenz der EFT-Näherung zeigt sich in der sehr guten Übereinstimmung der für T^* berechneten Werte mit experimentell über die Beziehung $\eta_S(T^*)/G = 5 \times 10^{-12}$ s ermittelten Werten [39].

2.3 Germanium

2.3.1 Eigenschaften von Germanium

2.3.1.1 Kristallines Germanium: c-Ge

Germanium (Ge), ein Element der 4. Hauptgruppe des Periodensystems, besitzt im Grundzustand eine Elektronenkonfiguration von $[Ar]3d^{10}4s^24p^2$ und kristallisiert unter Normalbedingungen in der kubisch-flächenzentrierten Diamantstruktur (fcc-Gitter) [148]. Jedes Ge-Atom ist vierfach koordiniert und bildet infolge der Hybridisierung der Valenzorbitale vier gerichtete kovalente sp^3 -Hybrid-Bindungen ($[Ar]3d^{10}4[sp^3]^4$) [148, 149]. Mit einer Bindungslänge von 2.450 Å richten sich die sp^3 Orbitale tetraedrisch unter dem größtmöglichen Bindungswinkel von 109.5° aus. Als indirekter Halbleiter beträgt die Bandlücke bei Raumtemperatur $E_g(T = 291 \text{ K}) = 0.664 \text{ eV}$. Weiterführende Informationen zur Bandstruktur von c-Ge finden sich bei Cardona et al. [150]. Reines Germanium ist unter Normalbedingungen stabil und erst eine starke Erwärmung unter Sauerstoffatmosphäre bewirkt eine Oxidation zu Germaniumoxid (GeO_2) [151]. Zudem zeigt kondensiertes Germanium eine um rund (4...10)% niedrigere Dichte im Vergleich zum flüssigen Aggregatzustand [152–154] ($\rho_{fl} = 5.51 \text{ g cm}^{-3}$ [152]). Tabelle 2.1 fasst ausgewählte strukturelle und physikalische Parameter von c-Ge zusammen.

2.3.1.2 Amorphes Germanium: a-Ge

Die Struktur und die Materialeigenschaften von amorphem Germanium (a-Ge) hängen entscheidend vom Prozess der Herstellung z.B. Ionenbestrahlung, chemische Gasphasenabscheidung (CVD) und Sputterdeposition (SD) ab. Die Herstellungsverfahren CVD [157] und SD [158] resultieren in strukturell inhomogenen amorphen Schichten, die eine große Anzahl von ungesättigten Bindungen, ausgedehnten Defekten sowie nanometergroßen Hohlräumen aufweisen. Dies spiegelt sich in der angegebenen stark schwankenden, gegenüber der kristallinen Phase deutlich reduzierten, mittleren Dichte von (3...12)% bzw. (5...28)% wider [157–160]. Für den Prozess der Amorphisierung mittels Ge-Ionenbestrahlung wurde eine gute Reproduzierbarkeit in der strukturellen Unordnung erzielt [161–164]. In Röntgenabsorptionsspektroskopie-Untersuchungen (EXAFS) wurde von Ridgway et al. die Bildung von 3- und 5-fach koordinierten Ge-Atomen sowie eine Vergrößerung der Bindungslänge auf 2.460 Å infolge der Ionenstrahl-induzierten Amorphisierung nachgewiesen und eine mittlere, nur leicht verringerte Koordinationszahl von 3.98 für die amorphe Ge-Phase bestimmt [161–164]. Weiterhin ist die amorphe Phase bestrebt eine tetraedrische Struktur aufgrund gerichteter kovalenter sp^3 -Hybrid-Bindungen zu bilden [153, 165]. Während die Zahl der nächsten Nachbarkatome kaum variiert, also eine eindeutig definierte Nahordnung vorliegt [165, 166], äußert

Tab. 2.1: Ausgewählte strukturelle und physikalische Eigenschaften von kristallinem Germanium. Bei temperaturabhängigen Parametern wurde der bei Raumtemperatur (300 K) ermittelte Wert angegeben [148, 149, 153, 155, 156].

Gittereigenschaften		elektronische Eigenschaften	
Bravais-Gitter	fcc	indirekte Bandlücke	0.644 eV
Raumgruppe	F d -3 m	direkte Bandlücke	0.797 eV
Gitterkonstante	5.65740 Å	Ionisierungsenergie	4.80 eV
Atomgewicht	72.60 u	Eigenleitfähigkeit	$2.1 \times 10^{-2} \Omega^{-1} \text{cm}^{-2}$
Dichte	5.3234 g cm ⁻³	Elektronenmobilität	3900 cm ² (Vs) ⁻¹
atomare Dichte	$4.41 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$	Löchermobilität	1900 cm ² (Vs) ⁻¹
thermische Eigenschaften		mechanische Eigenschaften	
Ausdehnungskoeff.	$5.9 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$	biax. Elastizitätsm.	$10.3 \times 10^{10} \text{N m}^{-2}$
spezifische Wärme	0.31 J g ⁻¹ K ⁻¹	elast. Konstante C ₁₁	$12.6 \times 10^{10} \text{N m}^{-2}$
Wärmeleitfähigkeit	0.59 W cm ⁻¹ K ⁻¹	elast. Konstante C ₁₂	$4.4 \times 10^{10} \text{N m}^{-2}$
therm. Diffusionsk.	0.36 cm ² s ⁻¹	elast. Konstante C ₄₄	$6.77 \times 10^{10} \text{N m}^{-2}$
Schmelzwärme	36.9 kg mol ⁻¹	Schermodul	$4.1 \times 10^{10} \text{N m}^{-2}$
Schmelzpunkt	1219 K	Poisson-Zahl	0.26
weitere Eigenschaften		optische Eigenschaften	
Debye-Temp.	374 K	Brechungsindex	4.1016 (2.06 μm)
Mikrohärte	780 kg mm ⁻²	Brechungsindex	5.56 (632.8 nm)

sich die fehlende Fernordnung in der Variation der Anzahl und Lage der übernächsten Nachbaratome infolge einer breiten Verteilung der Bindungswinkel (Streubreite $\approx 11^\circ$) und Bindungslängen (Streuung $\approx 0.08\text{\AA}$) [154]. Eine Vielzahl von Experimenten hat gezeigt, dass über Ionenbestrahlung hergestelltes a-Ge eine homogene, aber um (1...3)% niedrigere Dichte als c-Ge besitzt [154, 164, 167, 168]. Die Schmelztemperatur von a-Ge ist mit 968 K deutlich niedriger als die von c-Ge [152, 154]. Experimentell wurde das biaxiale Elastizitätsmodul von a-Ge zu $Y_{100}^{a-Ge} = 0.86Y_{100}^{c-Ge}$ (siehe Tab. 2.1) bestimmt [159] und durch molekulardynamische Computersimulationen (MD-Simulation), die eine allgemeine Abnahme aller elastischen Parameter von a-Ge gegenüber den Werten der kristallinen Phase zeigen, bestätigt [169].

2.3.2 Ionenstrahlinduzierte Effekte in Germanium

2.3.2.1 Formierung von Defekten

Hayes et al. untersuchten die Erzeugung von Defekten und den Amorphisierungsprozess in unterschiedlich orientierten Ge-Proben ([100], [111], [110] und [112]) infolge *niederenergetischer Ionenbestrahlung* (LEI, 300 keV Ar, $\Theta = 7^\circ$) bei einer Temperatur von $T = 15 \text{ K}$, da bei dieser Bestrahlungstemperatur thermische Ausheil-

prozesse ausgeschlossen werden können [96, 97]. Die Amorphisierung von Ge ist unabhängig von der kristallographischen Orientierung der Proben zum Ionenstrahl und wurde bei allen Proben im Maximum der nuklearen Energiedeposition für Fluenzen von $N_I^{am} \approx 6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ nachgewiesen [97]. Die fluenzabhängige Charakterisierung der Defektentwicklung im Rahmen des in Kapitel 2.2.1.2 vorgestellten vereinfachten Hecking-Modells ergaben für die Querschnitte P_a^{Ge} und G_a^{Ge} Werte von $4.5 \times 10^{-14} \text{ cm}^{-2}$ bzw. $8 \times 10^{-14} \text{ cm}^{-2}$. Die vergleichsweise hohen Werte für die Erzeugung von Defekten und amorphen Bereichen in Ge, $P_a^{Ge} \approx 5 \times P_a^{Si}$ [96], weisen auf eine direkte Erzeugung von amorphen Gebieten durch ein einzelnes Ion bei niedrigen Fluenzen hin, während die Werte für G_a^{Ge} ein effizientes Wachstum von bereits bestehenden amorphen Bereichen nahe legen [96, 97]. Eine systematische fluenzabhängige Untersuchung von Akkumulation und Rekombination ionenstrahlinduzierter Defekte in Ge wurde von Decoster et al. durchgeführt, welche die Amorphisierungsfluenz von Ge für Bestrahlung bei Raumtemperatur (RT) in Abhängigkeit von der Ionenmasse und -energie bestimmten [170].

Nordlund et al. untersuchten mittels MD-Simulation den Mechanismus der Defektformierung abhängig von der in nukleare Prozesse deponierten Energie in verschiedenen Halbleitern [171]. Speziell für Ge wurde entlang der Ionenbahn in der sich ausbildenden Stoßkaskade eine hohe Dichte an deplazierten, aber energiereichen Ge-Atomen nachgewiesen. Dies entspricht einer quasi-flüssigen Phase im Bereich der Stoßkaskade. Sehr hohe Abkühlungsraten verhindern eine komplette Rekristallisation dieser Gebiete, so dass die entstandene atomare Unordnung während des Erstarrens dauerhaft einfriert und somit die aus den experimentellen Ergebnissen gewonnene Annahme der direkten Erzeugung von amorphen Gebieten bekräftigt. Im Fall der Bestrahlung von Si resultieren die beobachteten ausgedünnten Stoßkaskaden ausschließlich in einer geringen Konzentration von isolierten Defekten bzw. kleinen Defektclustern [171]. Diese Unterschiede in der Defektformierung werden im Wesentlichen durch die unterschiedlichen Schmelztemperaturen und Atommassen von Ge und Si bedingt [171, 172].

Für die Bestrahlung von c-Ge mit *hochenergetischen monoatomaren Ionen* (z.B. 593 MeV Au [24]) wurde selbst bei hohen Bestrahlungsfluenzen von $N_I = 4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ nur eine relative Defektkonzentration von $n_{da} \approx (1 \dots 3)\%$ nachgewiesen [24, 173]. Demnach sind maximal 3% der Gitteratome von ihren regulären Gitterpositionen deplaziert, was darauf hindeutet, dass Strahlenschäden infolge hoher Energiedeposition durch monoatomare Ionen in Ge nicht stabil sind. Als Erklärung der Instabilität wird die diffusionsbedingte Ausheilung von bei Raumtemperatur beweglichen Punktdefekten sowie die effektive Schädenausheilung infolge der hohen elektronischen Energiedeposition ε_e diskutiert [24, 173]. SHI-Bestrahlungen von vorgeschädigten Ge-Proben (relative Defektkonzentration $n_{da} \approx 70\%$) zeigen mit zunehmender Bestrahlungsfluenz eine kontinuierliche Ausheilung, die eindeutig auf den hohen elektronischen Ener-

gieeintrag ($\varepsilon_e \approx (12 \dots 29) \text{ keV nm}^{-1}$) zurückgeführt werden konnte [174]. Für alle bisherigen Bestrahlungen von c-Ge mit monoatomaren Ionen und Energieeinträgen von $\varepsilon_e \leq 35 \text{ keV nm}^{-1}$ wurde keine Formierung von amorphen Ionenspuren beobachtet [141, 175, 176]. Es wird daher angenommen, dass der Schwellwert für die Erzeugung von amorphen Spuren in Ge weitaus größer sein muss und bisher nicht durch monoatomare Ionenbestrahlung erreicht bzw. überschritten wurde. In Untersuchungen von Komarov et al. wird die Bildung diskontinuierlicher Ionenspuren in c-Ge für die Bestrahlung mit 710 MeV Bi- ($\varepsilon_e = 37 \text{ keV nm}^{-1}$) und 1.3 GeV U-Ionen ($\varepsilon_e = 43 \text{ keV nm}^{-1}$) gezeigt und auf statistische Fluktuationen in der deponierten Energie entlang der Ionenflugbahn zurückgeführt [177]. Die Anzahl der beobachteten Spuren pro Einheitsfläche ist dabei mehr als eine Größenordnung kleiner als die Anzahl der pro Einheitsfläche eingeschossenen Ionen. Eine konservative Abschätzung für den Schwellwert ε_e^S , oberhalb dem die Bildung von kontinuierlichen Spuren zu beobachten sein sollte, ergibt einen Bereich von $\varepsilon_e^S \approx (46 \dots 49) \text{ keV nm}^{-1}$ [177]. Im Gegensatz zu monoatomaren Bestrahlungen wird für Experimente mit Fullerenen als Projektile ($E = 20, 30$ und 40 MeV) und Energieeinträgen von $\varepsilon_e = 37, 44$ und 51 keV nm^{-1} die Bildung von kontinuierlichen zylindrischen amorphen Spuren berichtet [178].

2.3.2.2 Formierung von Hohlräumen

A) Nukleare Energiedeponierung

Bereits 1982 führte Wilson erste Hochfluenzbestrahlungen (bis $N_I = 4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$) von Ge mit niederenergetischen Ge-Ionen durch und berichtete von einer strukturellen Modifikation des bestrahlten Materials über die gesamte Tiefe der Energiedeponierung [46]. Dieser Effekt wurde im Laufe der Jahre bei RT-Bestrahlungen an unterschiedlich orientierten Ge-Proben ([100], [110] und [111]) für eine Vielzahl schwerer Elemente ($Z_{Ion} \gtrsim Z_{Ge}$) mit Energien im Bereich $E \approx (0.05 \dots 1) \text{ MeV}$ nachgewiesen [46–56]. Zwei Größenordnungen oberhalb der Amorphisierungsfluenz (siehe Kap. 2.3.2.1) wurde für den Beginn der strukturellen Veränderungen in der amorphen Phase ein von den Bestrahlungsbedingungen nahezu unabhängiger Fluenzbereich $N_I^{krit} \approx 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ermittelt. Bestrahlungen mit Fluenzen größer als N_I^{krit} führen zu einer kontinuierlichen Verringerung des Reflexionsvermögens der Probenoberfläche (d.h. eine zunehmende schwarze Verfärbung) durch einen deutlichen Anstieg der Oberflächenrauigkeit R_a [47–49]. Fluenzabhängige Untersuchungen zeigen für $N_I > 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ einen linearen Anstieg der Oberflächenrauigkeit von $R_a(N_I = 0) \lesssim 1 \text{ nm}$ für unbestrahlte auf bis zu $R_a(N_I = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}) \approx (5 \dots 9) \text{ nm}$ für bestrahlte Oberflächen [179]. Die Untersuchung der bestrahlten Proben mittels Elektronenmikroskopie verdeutlicht die Formierung von Kratern an der Oberfläche, die sich mit wachsender Fluenz zu einer ausgedehnten porösen Oberflächenschicht ($d_p \approx (3 \dots 6) \times R_p$) bestehend aus $(10 \dots 100) \text{ nm}$

großen Hohlräumen sowie (10...35) nm dicken a-Ge-Wänden entwickeln. Eine mittlere Dichte dieser porösen Schichten wurde aus der resultierenden Volumenausdehnung in Richtung der Oberflächennormalen mit typischen Werten von $\Delta z \approx (0.2 \dots 1) \mu\text{m}$ abgeschätzt und beträgt (40...60)% des Wertes von a-Ge [47–52, 56]. Für leichte Elemente wie He, F, und Si wurde für Bestrahlungen mit Fluenzen bis zu $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ keine Bildung von Hohlräumen beobachtet [49]. Zudem stellt eine freie Probenoberfläche keine Voraussetzung für die Bildung von Kratern oder Hohlräumen dar, da bei Experimenten an mit Aluminium [49] und Siliziumdioxid [52] beschichteten a-Ge-Proben ebenfalls die Bildung einer porösen Struktur ausgehend von der Grenzfläche nachgewiesen wurde. Die Ausheilung von bestrahlten Proben, die eine als schwammartig-porös bezeichnete Struktur an der Oberfläche aufweisen, zeigen bis zu Temperaturen von $T = 940 \text{ K}$ eine komplette Rekristallisation der amorphen Bereiche (Wände der porösen Struktur), während die Struktur selbst nahezu unverändert erhalten bleibt [50].

Temperaturabhängige Untersuchungen weisen auf einen starken Einfluss der Bestrahlungstemperatur auf den Prozess der Hohlraumbildung hin [49, 51, 53]. Die kritische Fluenz N_I^{krit} , ab der die Hohlraumformierung beginnt, steigt mit sinkender Temperatur. Im Fall der Bestrahlung mit 125 keV Sn-Ionen bei Flüssig-Stickstoff-Temperatur (LNT, $T_{LNT} = 77 \text{ K}$) setzt die Formierung von Kratern an der Oberfläche erst ab einer kritischen Fluenz von $N_I^{krit} = 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ ein [49]. Bestrahlungen mit 1 MeV Ge-Ionen in einem Temperaturbereich von $T = 90$ bis 800 K bewirken eine deutliche Aufwölbung der bestrahlten Proben ausschließlich in einem Temperaturbereich von (200...500) K [51]. Unterhalb und oberhalb dieses Temperaturbereichs wurde bis zu einer Fluenz $N_I = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ nur ein Abtrag durch Sputterprozesse ohne die Formierung von Hohlräumen beobachtet [51]. Zudem berichten Ottaviano et al., dass sich bei einer konstanten Fluenz für Bestrahlungstemperaturen von $T > 463 \text{ K}$ der mittlere Durchmesser der Hohlräume kontinuierlich mit steigender Temperatur verkleinert, bis bei $T = 513 \text{ K}$ die bestrahlten Bereiche eine atomar flache, nahezu ungeschädigte und hohlraumfreie Oberfläche aufweisen [53]. Oberhalb dieser Temperatur erfolgt keine ionenstrahlinduzierte Amorphisierung von Ge [98, 180], was belegt, dass die Bildung von Hohlräumen infolge der Bestrahlung mit Ionen eine amorphe Ge-Phase voraussetzt.

B) Elektronische Energiedeponierung

Huber et al. berichten, dass RT-Hochfluenzbestrahlungen von c-Ge mit energiereichen Ionen mit einem oberflächennahen elektronischen Energieeintrag im Bereich von $\varepsilon_e = (14 \dots 28) \text{ keV nm}^{-1}$ ebenfalls zu einer Volumenausdehnung Δz infolge der Bildung *vergrabener* poröser Schichten führt [57, 58]. Im Unterschied zu niederenergetischen Bestrahlungen, bei denen keine Sättigung der Volumenausdehnung beobachtet wurde, zeigten die Ergebnisse der fluenzabhängigen Untersuchungen mit 185 MeV I-

und 266 MeV Au-Ionen nach einem starken Anstieg von Δz für Fluenzen größer $4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ eine konstante maximale Volumenausdehnung von $\Delta z = 900 \text{ nm}$ bzw. $2 \mu\text{m}$ [58]. Das Verhältnis der Tiefen $z_b/z_{\varepsilon_n^{max}}$ von der vergrabenen porösen Schicht z_b und dem Maximum der nuklearen Energiedeponierung $z_{\varepsilon_n^{max}}$ beträgt für winkelabhängige Bestrahlungen mit 266 MeV Au-Ionen $(z_b/z_{\varepsilon_n^{max}})^{\Theta=7^\circ} = 0.6$ bzw. $(z_b/z_{\varepsilon_n^{max}})^{\Theta=75^\circ} = 1$ [57, 58]. Dies deutet darauf hin, dass die Bildung vergrabener Hohlräume nicht allein auf elektronische oder nukleare Energiedeponierung zurückzuführen ist, sondern vielmehr auf einem gemeinsamen Effekt beider Energieeinträge, d.h. ε_e und ε_n , beruht [57].

Eine ausschließlich auf elektronische Energiedeponierung zurückzuführende Hohlraumbildung konnte von Wesch et al. in dünnen, unter einem Winkel von $\Theta = 45^\circ$ bestrahlten a-Ge-Schichten ($d_{am} = 3.1 \mu\text{m}$) auf c-Ge-Substrat nachgewiesen werden [181]. Der über die Dicke der amorphen Schicht d_{am} nahezu konstante Energieeintrag von $\varepsilon_e \approx 28 \text{ keV nm}^{-1}$ führt für $N_I \lesssim 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ zur Bildung von statistisch über d_{am} verteilten nanometergroßen Hohlräumen. Mit zunehmender Fluenz wird ähnlich der LEI-Untersuchung die Bildung einer schwammartigen porösen Struktur beobachtet, für die bei der höchsten Fluenz von $N_I = 1.5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ eine Volumenausdehnung von $\Delta z = 5 \mu\text{m}$ ermittelt wurde. Diese Strukturmodifikation der amorphen Schicht ist mit dem ebenfalls erstmalig in a-Ge beobachteten Effekt des plastischen Fließens (siehe Kap. 2.2.2.4, Abschnitt C) überlagert, so dass keine Quantifizierung der als positiv klassifizierten Deformationsausbeute A_0 im Rahmen des viskoelastischen Modells, das die Konstanz des Volumens voraussetzt, durchgeführt werden konnte [181].

Die Bestrahlungen von c-Ge unter denselben Bedingungen bewirken weder den Effekt der plastischen Deformation noch eine extreme Aufwölbung durch Hohlraumbildung an der Probenoberfläche [181]. Eine Volumenexpansion von $\Delta z \approx 100 \text{ nm}$ ist auf die im Bereich von ε_n^{max} induzierte Amorphisierung und der damit verbundenen strukturellen Dichteänderung (siehe Kap. 2.3.1.2) zurückzuführen. Für die höchste bestrahlte Fluenz wird in elektronenmikroskopischen Untersuchungen die Bildung von vergrabenen Hohlräumen in einer Tiefe von $\approx 2/3 \times \varepsilon_n^{max}$ nachgewiesen, wobei die Ursache, analog den Ergebnissen von Huber et al. [57], bisher nicht geklärt werden konnte [181].

2.4 Ionenstrahlinduzierte Formierung von Hohlräumen in anderen Halbleitern

Bereits 1980 wurde von Destefanis und Gailliard für Indiumantimonid (InSb) [182] und ab 1991 von Callec et al. für Galliumantimonid (GaSb) [183] eine intensive ionenstrahlinduzierte Hohlraumbildung für Fluenzen unmittelbar oberhalb der Amorphisierung ($N_I^{am} \approx (1 \dots 5) \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) beschrieben, die in einer großen Volumenausdehnung Δz resultiert. Für eine Vielzahl von Experimenten ($E = (0.05 \dots 1) \text{ MeV}$)

wurde mit zunehmender Fluenz eine stetig ansteigende Volumenausdehnung senkrecht zur Probenoberfläche nachgewiesen [184–190]. Eine zu erwartende Sättigung der Volumenausdehnung wurde bisher nicht beobachtet. Bereits bei Fluenzen von $N_I \gtrsim N_I^{am}$ bilden sich über die gesamte Eindringtiefe der Ionen einzelne, statistisch verteilte sphärische Hohlräume, die bei weiterer Bestrahlung sowohl in der Anzahl als auch in der Dimension anwachsen, akkumulieren und zur Ausbildung einer porösen Oberflächenschicht führen [185–187]. Diese als netzwerkartig beschriebenen Schichten, bestehend aus 10 nm dünnen und bis zu 300 nm langen untereinander verbundenen Nanodrähten [187, 188, 190], bleiben bis zu einer Ausheiltemperatur von $T = 873$ K stabil [185] und weisen eine Ausdehnung von $d_p \approx (8 \dots 12) \times R_p$ auf. Eine Charakterisierung des netzwerkartigen Materials nach Exposition an Atmosphäre mittels RBS und EXAFS ergab eine hohe, ungefähr 35%ige Konzentration von Sauerstoff und führte zu der Schlussfolgerung, dass die dünnen Nanodrähte aus einem amorphen GaSb Kern bestehen, der von einer $(2 \dots 3)$ nm dicken Galliumoxidschicht (Ga_2O_3) umgeben ist [188]. Für temperaturabhängige Bestrahlungen im Bereich von $T = (77 \dots 300)$ K wurde eine Verzögerung der Hohlraumbildung mit sinkender Bestrahlungstemperatur nachgewiesen [186].

In Ergänzung zu den in dieser Arbeit vorgestellten Untersuchungen an Ge wurden eigene, vergleichende Untersuchungen zur Ionenstrahlinduzierten Hohlraumbildung und deren Entwicklung in GaSb [191] und InSb [192] vorgenommen. Die wesentlichen Ergebnisse der systematischen fluenzabhängigen Bestrahlungen von GaSb und InSb mit 6 MeV I-Ionen zeigten eine starke Abhängigkeit der Hohlraumformierung von der Bestrahlungsprozedur und werden wie folgt zusammengefasst:

Für kontinuierlich bestrahlte GaSb-Proben, d.h. ohne zwischenzeitliche Strahlunterbrechung, wurde der in der Literatur vermutete lineare Anstieg der Volumenausdehnung mit wachsender Fluenz im Bereich von $N_I = (0.2 \dots 10) \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ bestätigt (siehe Abb. 2.8a: offene Vierecke). Zudem wurde erstmalig für $N_I > 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ eine Sättigung mit einer maximalen Volumenausdehnung von $\Delta z = 32 \text{ } \mu\text{m} \cong 18 \times R_p$ beobachtet. Akkumulative Bestrahlungen, bei der dieselbe Probe zwischen den einzelnen Bestrahlungsschritten stets ex-situ analysiert wurde, zeigen eine Reduzierung der bereits vorhandenen Volumenausdehnung mit jeder weiteren Bestrahlung der Probe oberhalb einer akkumulierten Fluenz von $N_I^* \approx 1.5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (geschlossene rote Kreise). Die kontinuierliche Bestrahlung von GaSb mit einer Fluenz von $N_I = 6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ resultiert in einer reproduzierbaren vertikalen Volumenausdehnung von $\Delta z = (16.1 \pm 0.5) \text{ } \mu\text{m}$ (geschlossenes schwarzes Viereck). Bei anschließender akkumulativer Bestrahlung derselben Probe (offene rote Kreise) wurde eine stetige, nahezu lineare Verringerung der Volumenausdehnung mit zunehmender akkumulierter Fluenz auf bis zu $\Delta z = 3 \text{ } \mu\text{m}$ beobachtet. Elektronenmikroskopische Untersuchungen (siehe Abb. 2.8b) zeigen unabhängig von der Bestrahlungsprozedur (kontinuierlich bzw. akkumulativ) für Fluenzen

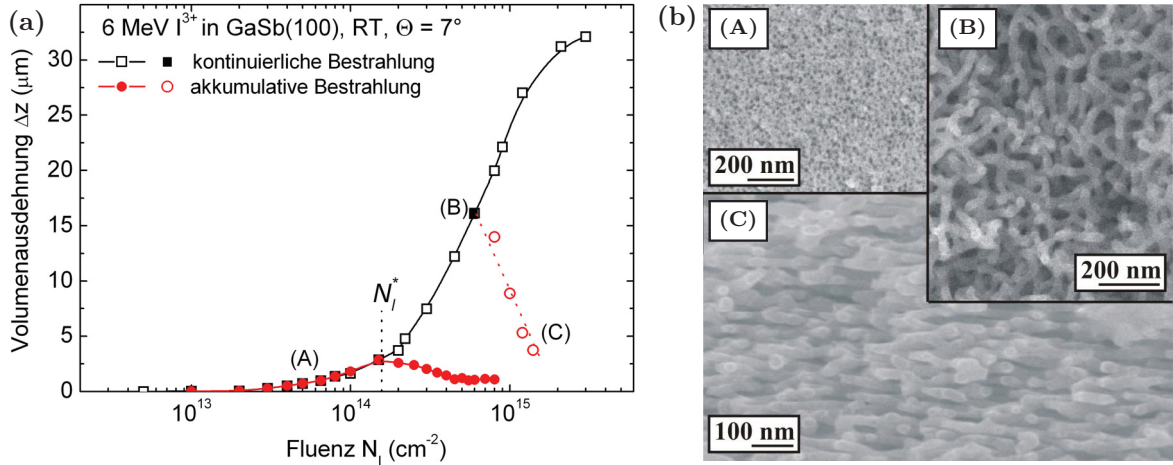


Abb. 2.8: Aus Oberflächenprofilometrie ermittelte vertikale Volumenausdehnung Δz als Funktion der Fluenz N_I für die bei RT mit 6 MeV I^{3+} -Ionen kontinuierlich bzw. akkumulativ bestrahlten GaSb-Proben (a). In (b) sind repräsentative cs-SEM-Aufnahmen dargestellt [191].

kleiner N_I^* die Bildung von sphärischen Hohlräumen über die gesamte Eindringtiefe der Ionen (A). Die durch die Bestrahlungsprozedur bedingten Unterschiede in der Volumenausdehnung für Fluenzen größer N_I^* sind auf eine Neuorientierung der sich oberhalb von N_I^* bildenden netzwerkartigen Struktur (B) zurückzuführen. Mit jeder weiteren akkumulativen Bestrahlung richten sich die Nanodrähte parallel zur Probenoberfläche bzw. senkrecht zum Ionenstrahl aus, bis sich eine kompakte Struktur bestehend aus dicht aufeinander liegenden Drähten gebildet hat (C) [191]. Die ionenstrahlinduzierte Ausrichtung der Drähte ist zudem unabhängig von den verwendeten Ionen (O, Si, I), der Energiedeposition sowie von den zur Belüftung verwendeten Gasen (Luft, hochreiner Sauerstoff, hochreines Argon) und wird ausschließlich bei wiederholter Bestrahlung bereits poröser Proben beobachtet. Akkumulative Bestrahlungen von Proben ohne ex-situ Charakterisierung (d.h. Bestrahlungspause im Hochvakuum) sowie mehrmaliges Be- und Entlüften der Bestrahlungskammer nach einer kontinuierlichen Bestrahlung haben keinen Einfluss auf die gebildete poröse Struktur. Der zugrunde liegende Mechanismus, der zu einer Neuorientierung der Nanodrähte bei akkumulativer Bestrahlung führt, ist bisher nicht geklärt. Als Ursache können jedoch chemische Prozesse mit den implantierten Ionen bzw. den Atomen des Belüftungsgases (Ar, chemisch inert), Sputtereffekte sowie ionenstrahlinduzierte plastische Deformationen ausgeschlossen werden. [191].

Die kontinuierliche Bestrahlung von InSb-Proben unter denselben Bestrahlungsbedingungen bewirkt ebenfalls eine linear von der Ionenfluenz abhängige Volumenexpansion mit einer Sättigungsausdehnung von $\Delta z = 50 \mu\text{m} \cong 27 \times R_p$. Ähnlich wie in GaSb wird die Bildung einer netzwerkartigen porösen Struktur beobachtet. Nachfolgende akkumulative Bestrahlungen dieser porösen Proben zeigen weder einen weiteren Anstieg noch eine Reduzierung der Volumenausdehnung, woraus geschlussfolgert werden kann, dass keine weitere ionenstrahlinduzierte Strukturmodifikation stattfindet [192].

Kapitel 3

Experimente

3.1 Probenpräparation

Die verwendeten kristallinen Ge-Wafer der Firma CrysTec [193] und PI-KEM [194] waren $(001) \pm 0.5^\circ$ orientiert, undotiert (spezifischer Widerstand $\rho_s \approx (46 \dots 65) \Omega \text{ cm}$), einseitig poliert und hatten eine Dicke von $500 \mu\text{m}$. Aus den gelieferten 2 bzw. 3 Zoll Wafern wurden Proben der Größe 5×5 bis $10 \times 10 \text{ mm}^2$ zugeschnitten und vor den Bestrahlungen im Ultraschallbad mit Aceton und Ethanol sowie deionisiertem Wasser gereinigt. In Abbildung 3.1 sind die (teilweise) erforderlichen Präparationsschritte schematisch dargestellt: Herstellung einer definierten amorphen Oberflächenschicht (a), Strukturierung der Probenoberfläche (b) sowie Maskierung der Probe während der Bestrahlung (c). Der Präparationsschritt (b) ist ausschließlich für die Experimente zum plastischen Fließen in a-Ge infolge hohem elektronischen Energieeintrag (SHI-Bestrahlungen) notwendig und wurde bei der Präparation der Proben für die Untersuchung der hohlrauminduzierten vertikalen Volumenausdehnung ausgelassen.

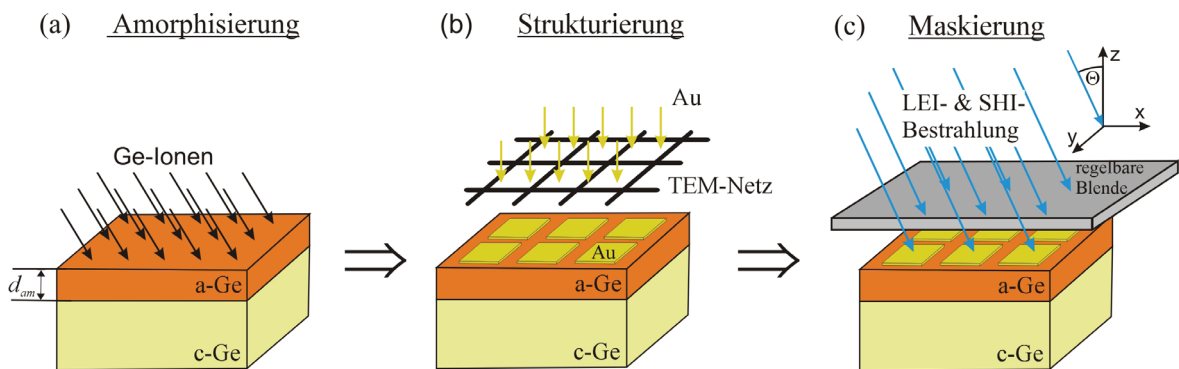


Abb. 3.1: Schematische Darstellung der Probenpräparation: Amorphisierung einer homogenen Oberflächenschicht definierter Dicke d_{am} (a), Strukturierung der Oberfläche (b) und Maskierung der Probe für die Unterscheidung von bestrahltem und unbestrahltem Material (c). Zudem ist in (c) die Geometrie der Ionenbestrahlung unter einem Einfallswinkel Θ bezogen auf das Einfallslot der Probe charakterisiert, wobei die Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche die Richtung der x-Achse definiert.

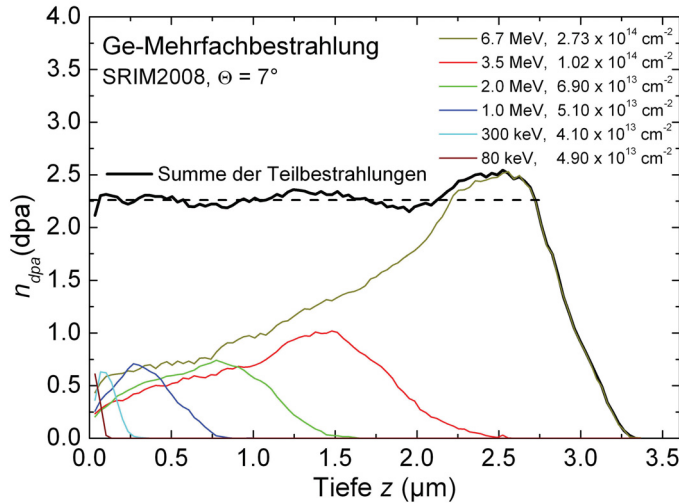


Abb. 3.2: Dargestellt sind die deplazierten Atome pro Gitteratom n_{dpa} als Funktion der Tiefe z der einzelnen Teilbestrahlungen sowie das Profil deren Summe [67].

(a) Amorphisierung einer Oberflächenschicht

Die Herstellung von homogen amorphen Oberflächenschichten reproduzierbarer Dicke $d_{am} = 3.1 \mu\text{m}$ erfolgte durch die ionenstrahlinduzierte Amorphisierung von c-Ge unter Verwendung von Ge-Mehrfachbestrahlung (Energie-Fluenz-Serien) am 3 MV Tandatron Beschleuniger des Instituts für Festkörperphysik (IFK) der Friedrich-Schiller-Universität (FSU) Jena sowie am 1.7 MV Pelletron Beschleuniger des Department of Electronic Materials Engineering (EME) der Australian National University (ANU) Canberra bei LNT-Kühlung auf eine Proben temperatur von $T = 100 \text{ K}$ und einem Druck von $p_{best} \approx 10^{-8} \text{ mbar}$ (siehe Abb. 3.1a). Bei einem durchschnittlichen Fluss von $\Phi = (3 \dots 5) \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ wurde, um mögliche Kanalisierungseffekte an Kristallachsen oder -ebenen zu vermeiden, die Amorphisierung unter einem Einfallswinkel von $\Theta = 7^\circ$ durchgeführt. Die entsprechenden Fluenzen und kinetischen Energien der einzelnen Teilbestrahlungen wurden unter Berücksichtigung der Ergebnisse von Hayes et al. [96, 97] und unter Verwendung des Programms SRIM2008 [66, 67] bestimmt und sind in Abbildung 3.2, in welcher der tiefenabhängige Verlauf der berechneten Versetzungen pro Gitteratom $n_{dpa}(z)$ aufgetragen ist, aufgelistet. Unter diesen Bestrahlungsbedingungen ist für die Überlagerung der einzelnen Teilprofile mit einem nahezu konstanten Wert von $n_{dpa} = 2.25 \text{ dpa}$ eine von der Probenoberfläche ausgehende homogene amorphe Schicht bis in eine Tiefe von $z = 3.1 \mu\text{m}$ zu erwarten (Analyse der a-Ge-Schichten siehe Kapitel 3.3).

(b) Strukturierung der Probenoberfläche

Die Untersuchungen zum plastischen Fließen erfolgten an selbstsichenden Proben, die am IFK und am EME mittels Gold-Bedampfung der Probenoberfläche durch direkt auf der Probe aufliegende Dünnsteg-Kupfer-Netzchen hergestellt wurden (siehe Abb. 3.1b). Die verwendeten Kupfer-Netzchen hatten einen Durchmesser von 3.05 mm bei einer Di-

cke von $\approx 12 \dots 15 \mu\text{m}$ und wiesen Stegbreiten von 10 und 35 μm bei Stegabständen von 63.5 bzw. 240 μm (Gitterdichte von 400 bzw. 100 mesh [195]) auf. Eine kontrollierte Steuerung der Aufdampfraten ermöglichte eine reproduzierbare Herstellung stabiler Strukturen mit einer durchschnittlichen Dicke von $d_{Au} \approx 30 \text{ nm}$. Mit diesen selbstkalibrierenden Proben konnten ionenstrahlinduzierte Verschiebungen mit einer Ortsauflösung von $\approx 0.5 \mu\text{m}$ nachgewiesen werden.

(c) Maskierung der Proben

Die Durchführung der Experimente (SHI- und LEI-Bestrahlungen) zum plastischen Fließen und zur vertikalen Volumenexpansion erfolgten mit der in Abbildung 3.1c dargestellten Strahlgeometrie, bei der ein Teil der Probe als vergleichende unbestrahlte Referenz permanent durch eine hinreichend dicke Blende, in der alle Ionen komplett abgebremst werden, abgedeckt wurde. Für die vielfältigen Anforderungen der unterschiedlichen Experimente und Probenkammern der Forschungseinrichtungen wurden am IFK der FSU Jena speziell an die Probenkammer angepasste, temperaturvariable Mehrfachprobenhalter entwickelt. Für eine optimale Ausnutzung der Strahlzeiten und Minimierung des Probenmaterials kamen Halter mit einer zweiten, stufenlos regelbaren Blende zum Einsatz, die eine fluenzabhängige Untersuchung durch akkumulierende Bestrahlung ermöglichen, indem Teile der ganzflächig bestrahlten Probe nach jeder Bestrahlung (Fluenzschritt) sukzessiv abgedeckt werden konnten. Zudem wurde für die SHI-Bestrahlung an dem neu installierten M3-Strahlzweig des Helmholtzzentrums für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt ein Probenhalter konzipiert, der, neben der idealen Ausnutzung der zur Verfügung stehenden Strahlzeit, den Vergleich von unter identischen experimentellen Bedingungen (Energie, Puls, Pulslänge, Strahldivergenz, usw.) bestrahlten kristallinen und amorphen Proben bei gleichzeitiger Raum- und Tieftemperaturbestrahlung ($T = (40 \dots 300) \text{ K}$) gewährleistet. Die Bestimmung sowie die permanente Überwachung der Bestrahlungstemperatur wurde durch ein Thermo-element, das direkt neben den Proben auf den Probenhaltern montiert war, realisiert, wobei die thermische Stabilität während der Bestrahlung durch die Steuerung von Heiz- und Kühlelementen über eine Software erfolgte.

3.2 Experimentelle Bedingungen

In Abbildung 3.3 sind am Beispiel der Bestrahlung mit Au-Ionen verschiedener kinetischer Energien (LEI- und SHI-Bestrahlungen) deren nukleare und elektronische Energieverluste in Ge als Funktion der Tiefe gegenübergestellt. Die LEI-Bestrahlungen, bei denen die Effekte infolge der dominierenden nuklearen Prozesse untersucht werden sollen, erfolgten mit Energien von einigen hundert keV bis einige MeV. Unter die-

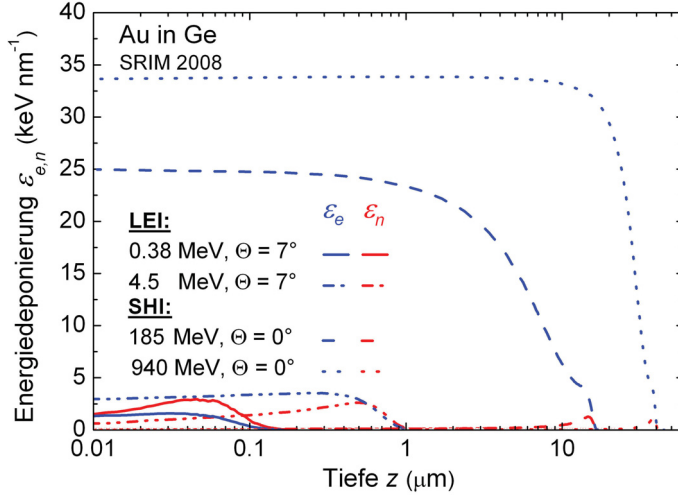


Abb. 3.3: Tiefenabhängige Darstellung der nuklearen ε_n und elektronischen ε_e Energiedeposition in Ge für die Bestrahlung mit Au-Ionen [66, 67].

sen Bedingungen kann für $E \leq 380$ keV der Einfluss ausschließlich oberflächennaher ($z \leq 200$ nm) Energiedeposition bzw. für $E = (3 \dots 9)$ MeV der Einfluss des nuklearen Energieeintrags ε_n in größerer Tiefe ($\varepsilon_n^{max}(z)$ bei $z(E) \approx (0.5 \dots 2) \mu\text{m}$) separat untersucht werden (vgl. Abb. 3.3). Dies ermöglicht detaillierte Aussagen über die Primärprozesse der strukturellen Modifizierung infolge hoher nuklearer Energiedeposition. Die bei den SHI-Bestrahlungen verwendeten kinetischen Energien von einigen hundert MeV gewährleisten einen hohen und konstanten elektronischen Energieeintrag über die gesamte Dicke der a-Ge-Schicht, d.h. $\varepsilon_e(z \leq d_{am}) \approx \text{const.}$, und ermöglichen die separate Untersuchung des Einflusses hoher elektronischer Energiedeposition auf Strukturumbildungsprozesse, da oberflächennah $\varepsilon_e \gg \varepsilon_n$ gilt (siehe Abb. 3.3).

Die LEI-Bestrahlungen der Ge-Proben mit niederenergetischen schweren Ionen bei RT erfolgte an den Beschleunigern am IFK in Jena. Hochfluenzbestrahlungen bei LNT wurden am EME in Canberra durchgeführt, da dort die technischen Voraussetzungen eine großflächige Bestrahlung bei möglichst kurzer Strahlzeit und entsprechend hohem, zu RT-Bestrahlungen vergleichbarem Ionenfluss erlauben. Zudem wurden am EME in Canberra SHI-Bestrahlungen mit Au-Ionen bei RT am 14UD Pelletron Beschleuniger (cw-Betrieb) durchgeführt, wobei kinetische Energien bis 185 MeV bei einem hohen Ionenfluss und kurzen Strahlzeiten realisiert wurden. Die Bestrahlung mit Au-Ionen bei tiefen Temperaturen ($T = 50$ K) mit Energien zwischen 280 und 1000 MeV erfolgten am UNILAC Beschleuniger (Puls-Betrieb) der GSI in Darmstadt. Die in dieser Arbeit verwendeten Ionen, kinetischen Energien E und Einfallswinkel Θ sind in Tabelle A.1 den mit SRIM2008 [66, 67] ermittelten Werten für nukleare ε_n und elektronische ε_e Energiedeposition sowie der projizierten Ionenreichweite R_p gegenübergestellt. Für die LEI-Bestrahlungen wurden für ε_n und ε_e die Maximalwerte und zusätzlich die Anzahl deplazierter Gitteratome im Maximum N_{displ}^{max} angegeben, während die Werte $\bar{\varepsilon}_n$ und $\bar{\varepsilon}_e$ bei den SHI-Bestrahlungen der über die gesamte amorphe Oberflächenschicht

d_{am} gemittelten Energiedeponierung entsprechen.

Alle Untersuchungen zur plastischen Deformation und zur Formierung von Hohlräumen sowohl bei LEI- als auch SHI-Bestrahlung erfolgten an c-Ge- und speziell präparierten a-Ge-Proben mit der in Abbildung 3.1 veranschaulichten Strahlgeometrie. Die Experimente wurden in Abhängigkeit von der Ionenart, dem Einfallswinkel, der Reichweite, der Fluenz, dem Ionenfluss, der Probertemperatur sowie der nuklearen und elektronischen Energiedeponierung vorgenommen. Die entsprechenden experimentellen Bestrahlungsbedingungen sind in Tabelle A.2 aufgelistet. Bei konstantem Strahlstrom, d.h. konstantem Ionenfluss beträgt die Genauigkeit der Fluenz zwischen $\pm (1 \dots 2)\%$ für alle in dieser Arbeit an den unterschiedlichen Beschleunigern durchgeführten LEI-Bestrahlungen. Am EME in Canberra konnten SHI-Hochfluenzbestrahlungen bei ebenfalls konstantem Ionenfluss mit einer Genauigkeit von $\pm (7 \dots 11)\%$ durchgeführt werden, während an dem neu aufgebauten Strahlzweig an der GSI lediglich eine Genauigkeit von $\approx \pm 50\%$ gewährleistet werden konnte. Zudem variierte an der GSI der Ionenstrom, und es kam zu Veränderungen der Bestrahlungsparameter (Pulsfrequenz, Pulslänge, usw.) in den durch niedrige Strahlströme bedingten langen Strahlzeiten.

3.3 Analyseverfahren

Die fluenzabhängige Untersuchung aller in dieser Arbeit unter verschiedenen Bedingungen bestrahlten c- und a-Ge-Proben (siehe Tab. A.2) sowie der entsprechenden unbestrahlten Referenzproben erfolgte ex-situ unter Verwendung verschiedener komplementärer Analyseverfahren. Zur Untersuchung der Strahlenschäden und der atomaren Struktur bzw. zur Charakterisierung der induzierten amorphen Oberflächenschichten wurden Rutherford-Weitwinkelstreuung (RBS/C), Raman-Spektroskopie (RS) und Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) durchgeführt. Die Analysen zu ionenstrahlinduzierten Strukturmodifikationen der bestrahlten Bereiche erfolgte sowohl lateral als auch senkrecht (tiefenabhängig) zur Ge-Probenoberfläche unter Verwendung von Oberflächenprofilometrie, Rasterkraftmikroskopie (AFM), Lichtmikroskopie und Elektronenmikroskopie (EM). Weiterführende Informationen zu den jeweiligen Analysemethoden und den verwendeten Konfigurationen sind in Anhang A.2 beschrieben.

3.4 Molekulardynamische Simulation

Auf Basis der experimentellen Ergebnisse wurde der Effekt der Hohlraumformierung in a-Ge infolge hinreichend hoher elektronischer Energieeinträge molekulardynamisch simuliert. Weitere Details zu den in dieser Arbeit durchgeführten MD-Simulationen werden im Anhang A.3 erläutert.

Kapitel 4

Ergebnisse

4.1 Niederenergetische Ionenbestrahlung

4.1.1 Ionenstrahlinduzierte Amorphisierung

4.1.1.1 Defektformierung und Amorphisierung

Die infolge niederenergetischer Ionenbestrahlung induzierte Defektformierung in c-Ge ist in Abbildung 4.1 für den Fall der Raumtemperaturbestrahlung mit 3 MeV I-Ionen unter einem Einfallswinkel von $\Theta = 7^\circ$ für ausgewählte Bestrahlungsfluenzen dargestellt [196]. Die aus den durchgeführten RBS/C-Untersuchungen ermittelten und in Abbildung 4.1a über der Tiefe z aufgetragenen relativen Defektkonzentrationen n_{da} zeigen über den gesamten Bereich der Energiedeponierung einen mit zunehmender Bestrahlungsfluenz kontinuierlichen Anstieg. Die sich ausbildende charakteristische Defektverteilung weist sowohl im Profil $n_{da}(z)$ als auch für die Tiefe des Defektmaximums bei $z = 575$ nm eine sehr gute Übereinstimmung mit der berechneten Tiefenverteilung der Anzahl deplazierter Gitteratome $N_{displ}(z)$ (gestrichelte Linie in Abb. 4.1a) auf. Die Entstehung der Defekte ist daher ausschließlich auf nukleare Wechselwirkungen $\varepsilon_n(z)$ zurückzuführen [196]. Ein substantieller Einfluss der elektronischen Energiedeponierung auf die Defektformierung ist in diesem Energiebereich auszuschließen [22, 98, 173].

In Abbildung 4.1b ist die im Maximum der Verteilungen ermittelte Defektkonzentration n_{da}^{max} über der Fluenz N_I aufgetragen. Die Defektkonzentration n_{da}^{max} steigt kontinuierlich mit zunehmender Fluenz an, wobei der funktionelle Zusammenhang sehr gut im Rahmen des vereinfachten Hecking-Modells (vgl. Kap. 2.2.1.2, Gl. 2.8) beschrieben werden kann. Zu Beginn der Bestrahlung, wenn jedes Ion auf kristallines Material trifft und sich die einzelnen Stoßkaskaden nicht überlappen, wird die Bildung von Defekten durch den Parameter P_a quantifiziert. Der hohe Wert von $P_a = 9.4 \times 10^{-14} \text{ cm}^{-2}$ bestätigt die Vermutung der direkten Erzeugung von amorphen Gebieten durch ein

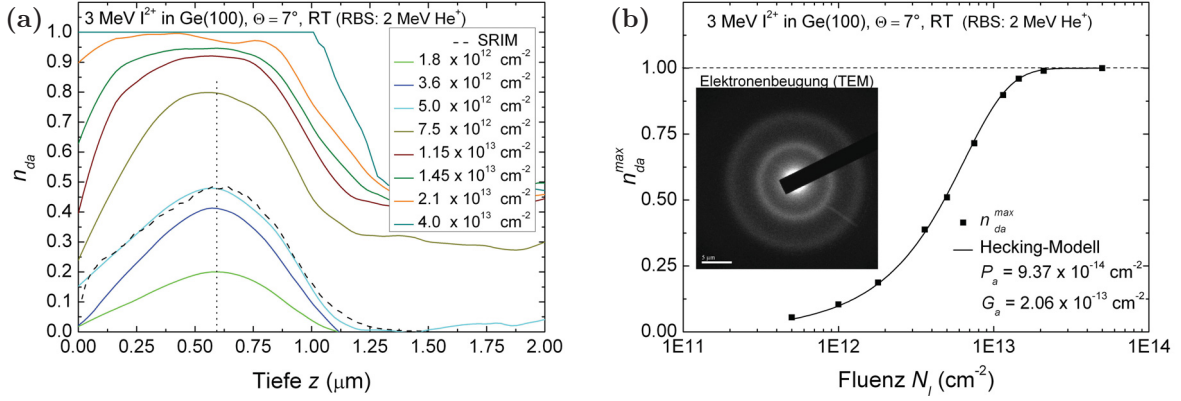


Abb. 4.1: Tiefenabhängige Darstellung der relativen Defektkonzentration n_{da} für die RT-Bestrahlung von c-Ge mit 3 MeV I^{2+} unter einem Einfallswinkel von $\Theta = 7^\circ$ (a). Die Anzahl deplazierter Gitteratome N_{displ} (gestrichelte Linie, SRIM2008 [66, 67]) ist zum Vergleich in beliebigen Einheiten eingezeichnet. Die im Maximum der Verteilung ermittelte relative Defektkonzentration n_{da}^{max} ist in (b) als Funktion der Fluenz N_I aufgetragen. Zusätzlich wird ein Elektronenbeugungsbild einer amorphisierten Probe ($N_I = 4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) gezeigt [196].

einzelnes Ion (siehe Kap. 2.3.2.1). Ein effizientes Wachstum von bereits bestehenden amorphen Bereichen beginnt, sobald die Stoßkaskaden anfangen sich zu überlappen. Im Bereich des Defektmaximums resultiert dies bei einer Amorphisierungsfluenz von $N_I^{am} \approx 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ in der kompletten Zerstörung der Kristallstruktur, d.h. $n_{da} = 1$. Die normierte Fluenz beträgt in diesem Fall $n_{dpa}(N_I^{am}) = 0.44 \text{ dpa}$. Bei fortlaufender Bestrahlung mit $N_I > 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ verbreitert sich der vergrabene amorphe Bereich um das Maximum in Richtung Probenoberfläche und in die Tiefe, bis sich eine homogen geschädigte amorphe Schicht ausgehend von der Probenoberfläche mit einer Dicke d_{am} gebildet hat (siehe Abb. 4.1a: $d_{am} \approx 1 \mu\text{m}$ für $N_I = 4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$). In Übereinstimmung mit den RBS/C-Untersuchungen zeigen die TEM-Analysen an einer mit $N_I = 4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten Probe eine homogene amorphe Schicht von der Oberfläche bis in eine Tiefe von $z = d_{am} = 1.08 \mu\text{m}$, wobei die für eine amorphe Phase charakteristischen diffusen Beugungsringe (Elektronenbeugung, siehe Abb. 4.1b) die komplette Zerstörung der Fernordnung verdeutlichen [196]. Das im Raman-Spektrum in Abbildung 4.2 deutlich ausgeprägte Intensitätsmaximum (Raman-Peak) von c-Ge bei $\nu = 300 \text{ cm}^{-1}$ sinkt stark in der Intensität, verbreitert sich asymptotisch und verschiebt sich infolge der ionenstrahlinduzierten Defektformierung zu kleineren Wellenzahlen ν bis zur für a-Ge charakteristischen transversalen optischen Mode (TO-Peak) bei $\nu \approx 264 \text{ cm}^{-1}$ [197–201]. Die ionenstrahlinduzierte Änderung des Raman-Peaks wird auf die Zerstörung der Gitterstruktur sowie der daraus resultierenden Streuung und räumlichen Beschränkung der Phononen zurückgeführt.

In guter Übereinstimmung mit den in der Literatur angegebenen Werten für N_I^{am} (vgl. Kap. 2.3.2.1 und 2.3.2.2, Abschnitt A) führt die LEI-Bestrahlung von c-Ge in

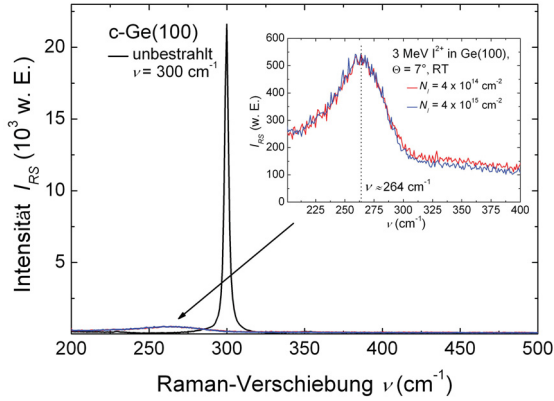


Abb. 4.2: Wellenzahlabhängige Darstellung der Raman-Intensität I_{RS} einer unbestrahlten c-Ge(100) Referenzprobe und zwei mit 3 MeV I^{2+} bestrahlten Proben (a-Ge).

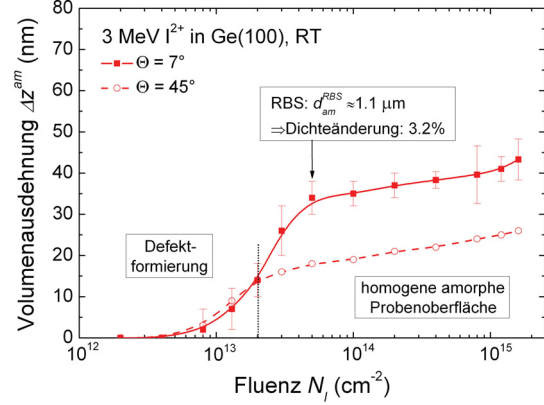


Abb. 4.3: Fluenzabhängige Darstellung der aus Oberflächenprofilometrie ermittelten Volumenausdehnung Δz^{am} infolge der durch Amorphisierung induzierten Dichteänderung.

einem Fluenzbereich von $N_I = (1 \dots 5) \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ zur kompletten und homogenen Amorphisierung der Probenoberflächen für alle in dieser Arbeit verwendeten schweren niederenergetischen Ionen (vgl. LEI-Bestrahlungen, Tab. A.1). Unter LNT-Bedingungen verringert sich die zur Amorphisierung erforderliche Fluenz N_I^{am} [93, 95], da intrinsische Defekte bei diesen Temperaturen nahezu unbeweglich sind und folglich die thermisch induzierte Defektrekombination, bei der innerhalb der primären Stoßkaskaden eine Reduzierung der relativen Schädigung erfolgt, ausgeschlossen werden kann (siehe [98]). Zusammenfassend wird geschlussfolgert, dass die ionenstrahlinduzierte Amorphisierung von c-Ge durch niederenergetische Ionen in einem Fluenzbereich abgeschlossen ist, der mehr als zwei Größenordnungen kleiner als die kritische Fluenz N_I^{krit} ist, bei der die in der Literatur beschriebenen morphologischen Strukturmodifikationen einsetzen [46–56].

4.1.1.2 Volumenausdehnung infolge struktureller Dichteänderung

Die Quantifizierung der vertikalen Volumenausdehnung durch Oberflächenprofilometrie erfolgt bei der Bestrahlung von c-Ge-Proben relativ zu den unbestrahlten Referenzbereichen, d.h. im Vergleich zur kristallinen Probenoberfläche. Folglich ist die auf die Amorphisierung zurückzuführende strukturelle Dichteänderung $\Delta\rho$, die ebenfalls zu einer substantiellen Volumenausdehnung senkrecht zur Probenoberfläche beiträgt, systematisch in Abhängigkeit von der Fluenz zu untersuchen, da diese der in den folgenden Kapiteln betrachteten hohlrauminduzierten Volumenausdehnung überlagert ist [196]. In Abbildung 4.3 ist die durch die Amorphisierung induzierte Aufwölbung Δz^{am} am Beispiel der Bestrahlung von c-Ge mit 3 MeV I-Ionen für einen Einfallswinkel von 7° und 45° dargestellt. Für beide Einfallswinkel zeigt sich ein ähnlicher fluenzabhängiger Verlauf, der charakterisiert ist durch einen kontinuierlichen

Anstieg in Δz^{am} mit zunehmender Fluenz, d.h. mit zunehmender Defektformierung (vgl. Abb. 4.1b), bis die Aufwölbung bei $N_I \approx 5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ in eine Sättigung mit Werten von $\Delta z_S^{am}(\Theta = 7^\circ) \approx 35 \text{ nm}$ und $\Delta z_S^{am}(\Theta = 45^\circ) \approx 20 \text{ nm}$ übergeht. In diesem Fluenzbereich hat sich eine homogene amorphe Oberflächenschicht gebildet (siehe Abb. 4.1a), deren Verhältnis $d_{am}^{7^\circ}/d_{am}^{45^\circ} \approx 1.69$ das Verhältnis der Sättigungsausdehnung $\Delta z_S^{am}(\Theta = 7^\circ)/\Delta z_S^{am}(\Theta = 45^\circ) \approx 1.75$ widerspiegelt. Der leichte Anstieg in Δz^{am} für fortlaufende Bestrahlungen kann einer persistenten, aber geringen Verbreiterung der amorphen Schicht zugeschrieben werden. Zudem zeigen cs-TEM-Untersuchungen für die mit einer Fluenz von $N_I \leq 1.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten Proben, dass die ionenstrahlinduzierten amorphen Schichten homogen sind und keine Poren oder Hohlräume aufweisen. Basierend auf der experimentell ermittelten Volumenausdehnung sowie den aus TEM-Analysen ermittelten Schichtdicken wurde für die ionenstrahlinduzierte Amorphisierung von Ge unabhängig von den Bestrahlungsparametern in guter Übereinstimmung mit der Literatur [154, 159, 160, 164, 167, 168] eine Verringerung der Dichte von $\Delta \rho = \Delta z^{am}/d_{am}^{TEM} = 3.2\%$ bestimmt [196].

4.1.2 Ionenstrahlinduzierte Hohlraumformierung

4.1.2.1 Hohlraumformierung in Abhängigkeit von der Ionenenergie und dem Einfallswinkel

A) Vertikale Volumenausdehnung

An allen mit I-Ionen bei Raumtemperatur bestrahlten c-Ge-Proben wurde für Fluenzen $N_I > 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ eine extreme vertikale Volumenexpansion $\Delta z \gg \Delta z^{am}$ nachgewiesen, die in Abbildung 4.4 als Funktion der Fluenz dargestellt ist. Die kleinste in Abbildung 4.4 aufgetragene Fluenz entspricht der größten Fluenz aus Abbildung 4.3 und repräsentiert somit die anfängliche Volumenausdehnung infolge der Formierung

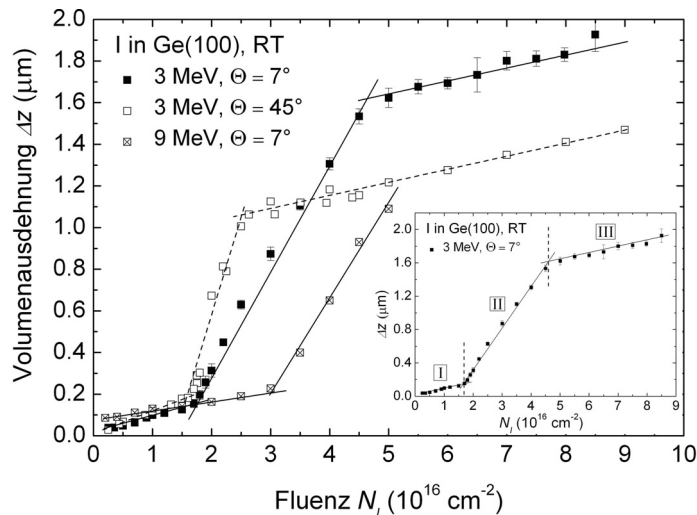


Abb. 4.4: Fluenzabhängige Darstellung der aus Oberflächenprofilometrie ermittelten mittleren vertikalen Volumenausdehnung Δz für die bei Raumtemperatur mit 3 und 9 MeV I-Ionen unter einem Einfallswinkel von $\Theta = 7^\circ$ und 45° bestrahlten c-Ge-Proben. Zur besseren Veranschaulichung der scharfen Übergänge zwischen den drei Bereichen (I - III) wurden die Daten linear interpoliert [196].

einer definierten homogenen amorphen Oberflächenschicht Δz^{am} (beachte die logarithmische und lineare Darstellung der Abszissenachse in Abb. 4.3 bzw. 4.4). Der fluenzabhängige Verlauf der Volumenausdehnung $\Delta z(N_I)$ kann eindeutig in drei abrupt ineinander übergehende Bereiche (*I* - *III*), in denen Δz einen nahezu linearen Zusammenhang mit der Fluenz N_I aufweist ($\Delta z = \gamma N_I$), eingeteilt werden (vgl. auch Tab. 4.1). Während der Bereich *I* durch einen relativ geringen Gradienten γ_I gekennzeichnet ist, steigt Δz im Bereich *II* rapide mit der Fluenz an ($\gamma_I < \gamma_{II}$) bis bei hohen Fluenzen im Bereich *III* der Gradient erneut abnimmt $\gamma_{III} < \gamma_{II}$. Die Abhängigkeit der Volumenausdehnung von der projizierten Ionenreichweite $R_p(\Theta)$ zeigt sich in Abbildung 4.4 durch die im Bereich *III* deutlich voneinander verschiedenen Volumenausdehnungen infolge winkelabhängiger Bestrahlung mit Ionen gleicher kinetischer Energie. Bestätigt wird dies durch die sehr gute Übereinstimmung der Verhältnisse aus den unmittelbar zu Beginn des Bereichs *III* ermittelten Werten für Δz und den mit SRIM2008 berechneten Werten für R_p (siehe Tab. A.1) [196]:

$$\text{Volumenausdehnung (Bereich III)} : \frac{\Delta z^{7^\circ}}{\Delta z^{45^\circ}} = \frac{1.67 \mu\text{m}}{1.12 \mu\text{m}} = 1.49 \quad (4.1)$$

$$\text{Ionenreichweite} : \frac{R_p^{7^\circ}}{R_p^{45^\circ}} = \frac{835 \text{ nm}}{555 \text{ nm}} = 1.50. \quad (4.2)$$

Für die Bestrahlung mit $E = 9 \text{ MeV}$ und der daraus resultierenden deutlich erhöhten Eindringtiefe konnte der Bereich *III* aufgrund der niedrigen Endfluenz von $N_I = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ nicht experimentell nachgewiesen werden. Eine grobe Abschätzung der im Bereich *III* zu erwartenden Volumenausdehnung ist dennoch unter Verwendung der Gleichungen 4.1 und 4.2 zu $\Delta z_{9\text{MeV}} = [R_p^{9\text{MeV}} / R_p^{3\text{MeV}}] \times \Delta z_{3\text{MeV}} \approx 5.4 \mu\text{m}$ möglich. Die erforderliche Fluenz für den Übergang zu Bereich *III* kann auf der Grundlage des linearen Zusammenhangs von Δz und N_I kalkuliert werden und ist bei einer Fluenz von $N_I \approx 1.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ zu erwarten.

Die aus Abbildung 4.4 ermittelten Schwellwert-Fluenzen der einzelnen Bereiche sowie deren zugehörige Gradienten sind in Tabelle 4.1 für die diskutierten Bestrahlungsbedingungen aufgelistet. Die Schwellwert-Fluenzen sinken deutlich mit zunehmender nuklearer Energiedeponierung ε_n ab (siehe Tab. 4.1), d.h. je größer ε_n umso kleiner ist die benötigte Fluenz, um im Festkörper die gleiche Energie pro Wegeinheit zu deponieren. Die in Abhängigkeit von der Fluenz beobachtete optische Veränderung der bestrahlten Probenoberfläche ist in der in Abbildung 4.5 dargestellten Lichtmikroskopaufnahme einer mit verschiedenen Fluenzen bestrahlten c-Ge-Probe deutlich zu erkennen. Die für die drei Bereiche charakteristische Verfärbung ist in der rechten Spalte von Tabelle 4.1 aufgelistet. Generell zeigt sich für vergleichbare Bestrahlungsbedingungen eine sehr gute Reproduzierbarkeit der ionenstrahlinduzier-

Tab. 4.1: Experimentell bestimmte Schwellwert-Fluenzen N_I^S und Gradienten γ der Bereiche *I* bis *III* für Raumtemperaturbestrahlungen mit I-Ionen (Energie E , Einfallswinkel Θ und nukleare Energiedeponierung ε_n). Zusätzlich ist für jeden Bereich die charakteristische Veränderung der bestrahlten Probenoberflächen (Verfärbung) aufgeführt.

	E (MeV)	Θ (°)	ε_n (eV Å ⁻¹)	N_I^S (10 ¹⁶ cm ⁻²)	γ (nm/10 ¹⁶ cm ⁻²)	Oberflächen- verfärbung
<i>I</i>	3.0	7	161.3	0.25	86.2	Grau bis Dunkelgrau
	3.0	45	212.1	0.2	118.1	
	9.0	7	120.9	0.4	47.4	
<i>II</i>	3.0	7	161.3	1.7	485.3	Schwarz
	3.0	45	212.1	1.55	837.5	
	9.0	7	120.9	2.8	458.6	
<i>III</i>	3.0	7	161.3	4.75	71.8	Matt/Silberglänzend
	3.0	45	212.1	2.6	68.0	Schwarz
	9.0	7	120.9	> 5.0	-	-

ten Volumenausdehnung innerhalb der experimentellen Messgenauigkeit. Die Bestrahlung von vorpräparierten a-Ge-Schichten (siehe Kap. 3.1) führt zu dem gleichen fluenzabhängigen Verlauf der Volumenausdehnung $\Delta z(N_I)$ wie die Bestrahlung von c-Ge (vgl. Abb. 4.4). Die in den Bereichen *I* und *II* ermittelte geringe Differenz von $\Delta z_{c-Ge} - \Delta z_{a-Ge} = (26 \dots 38) \text{ nm} \approx \Delta z^{am}$ kann sehr gut mit der in Kapitel 4.1.1.2 diskutierten zusätzlich bei c-Ge auftretenden Volumenausdehnung infolge der Amorphisierung erklärt werden. Weiterhin wurde im Gegensatz zu den Materialien GaSb und InSb (vgl. Kap. 2.4 sowie [191, 192]) kein Unterschied in Δz für kontinuierlich und akkumulativ bestrahlte Ge-Proben festgestellt [196].

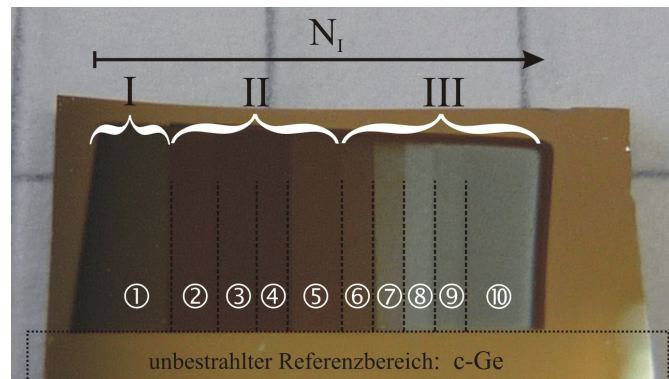


Abb. 4.5: Die Lichtmikroskopaufnahme zeigt eine bestrahlte Ge-Probe, bei der sich die einzelnen Fluenzbereiche sowohl untereinander als auch im Vergleich zum unbestrahlten Referenzbereich deutlich durch ihre charakteristische ionenstrahlinduzierte Verfärbung unterscheiden. Die Bestrahlungen fanden bei RT mit 3 MeV I²⁺-Ionen unter $\Theta = 7^\circ$ mit $N_I = 1.2$ (1), 1.9 (2), 2.5 (3), 3.5 (4), 4.5 (5), 5.0 (6), 5.5 (7), 6.0 (8), 7.0 (9), $8.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (10) statt.

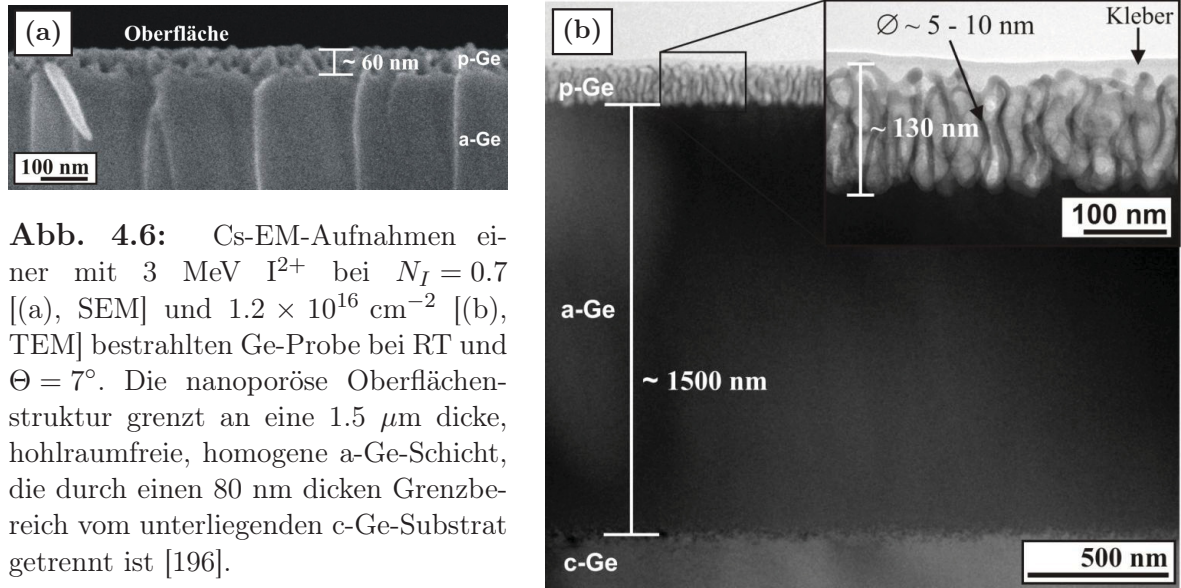


Abb. 4.6: Cs-EM-Aufnahmen einer mit 3 MeV I^{2+} bei $N_I = 0.7$ [(a), SEM] und $1.2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ [(b), TEM] bestrahlten Ge-Probe bei RT und $\Theta = 7^\circ$. Die nanoporöse Oberflächenstruktur grenzt an eine $1.5 \mu\text{m}$ dicke, hohlraumfreie, homogene a-Ge-Schicht, die durch einen 80 nm dicken Grenzbe-
reich vom unterliegenden c-Ge-Substrat
getrennt ist [196].

B) Elektronenmikroskopische Charakterisierung

Tiefenabhängige Formierung von porösen Schichten

Die Analyse der ionenstrahlinduzierten Strukturmodifikationen mittels Elektronenmikroskopie (EM) erfolgt am Beispiel der Bestrahlung mit 3 MeV I-Ionen unter $\Theta = 7^\circ$ an entsprechend den drei charakteristischen Bereichen ausgewählten Proben [196].

Aus den in Abbildung 4.6 dargestellten cs-EM-Aufnahmen einer im Bereich *I* mit $N_I = 0.7$ (a) und $1.2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (b) bestrahlten Ge-Probe geht hervor, dass die beobachteten makroskopischen Veränderungen auf die direkt von der Probenoberfläche ausgehende Bildung einer nanoporösen Schicht zurückzuführen sind. Abbildung 4.6b zeigt eine stabile nanoporöse Struktur mit Wandstärken von (5...10) nm und einer z-Ausdehnung von $d_p = 130 \text{ nm}$. Die schlauchförmigen, senkrecht zur Probenoberfläche orientierten Hohlräume haben einen Durchmesser von (10...30) nm. Zudem wird in der cs-TEM-Aufnahme deutlich, dass die Bestrahlung mit I-Ionen unterhalb der porösen Schicht zur Bildung einer $1.5 \mu\text{m}$ dicken, hohlraumfreien, homogenen a-Ge-Schicht geführt hat, die zum unterliegenden c-Ge-Substrat durch einen ungefähr 80 nm dicken, inhomogen geschädigten Übergangsbereich begrenzt wird.

In Abbildung 4.7 zeigen cs-SEM-Aufnahmen von repräsentativen Ge-Proben den Übergang von Bereich *I* zu *II*. Ab einer Fluenz von $N_I = 1.7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (Abb. 4.7a) bilden sich in der bisher homogenen a-Ge-Schicht in einem mittleren lateralen Abstand von $\approx 800 \text{ nm}$ vergrabene isolierte sphärische Hohlräume mit einem Durchmesser von (5...13) nm aus. Mit weiterer Bestrahlung wächst sowohl die Dichte als auch der mittlere Durchmesser der vergrabenen Hohlräume, was bereits für Fluenzen von $N_I = 1.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (Abb. 4.7b) in einer in definierter Tiefe z_b lokalisierten vergrabenen hohlraumreichen Schicht resultiert [196]. Unabhängig von der Ionenenergie

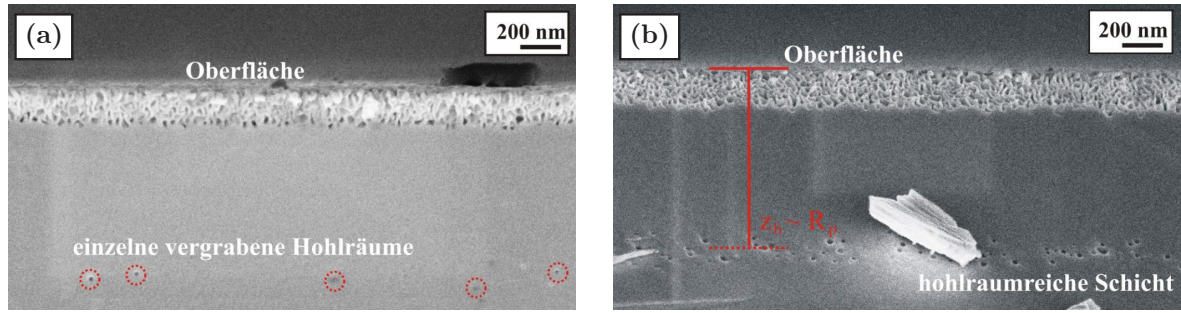


Abb. 4.7: Cs-SEM-Aufnahmen einer mit 3 MeV I^{2+} -Ionen bestrahlten Ge-Probe bei RT und $\Theta = 7^\circ$. Die Fluenz beträgt 1.7 (a) bzw. $1.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (b). In (a) ist die Bildung von einzelnen vergrabenen sphärischen Hohlräumen innerhalb der homogenen a-Ge-Schicht dargestellt, die mit steigender Fluenz (b) zur Bildung einer vergrabenen porösen Schicht im Tiefenbereich der projizierten Ionenreichweite R_p führt [196].

und dem Einfallswinkel wurde in allen mit I-Ionen bestrahlten Ge-Proben eine qualitativ vergleichbare ionenstrahlinduzierte Strukturmodifikation nachgewiesen, d.h. die Formierung einer porösen Oberflächenschicht (Bereich I) und die Bildung von vergrabenen Hohlräumen (Bereich II). Die aus den EM-Untersuchungen ermittelte Tiefe vergrabener Hohlräume z_b beträgt, bezogen auf die ursprünglich kristalline Oberfläche, 825 nm (3 MeV, $\Theta = 7^\circ$, Abb. 4.7), 550 nm (3 MeV, $\Theta = 45^\circ$) und 2600 nm (9 MeV, $\Theta = 7^\circ$). Der Vergleich von z_b mit der in Abbildung 4.1 experimentell bestimmten ionenstrahlinduzierten Defektverteilung bzw. dem infolge nuklearer Energiedeponierung kalkulierten Tiefenprofil der Anzahl deplazierter Gitteratome N_{displ} zeigt deutlich, dass z_b größer ist als die Tiefe, in der die Defektkonzentration bzw. die Energiedeponierung ihren maximalen Wert annimmt. Demnach entstehen die vergrabenen Hohlräume nicht in der Tiefe des Maximums der nuklearen Energiedeponierung. Vielmehr weisen die Experimente die Entstehung der vergrabenen Hohlräume im Tiefenbereich der projizierten Ionenreichweite nach, d.h. es gilt $z_b = R_p$ (vgl. Tab. A.1) [196].

Die Formierung einer vergrabenen porösen Schicht sowie die kontinuierliche Ausdehnung beider ionenstrahlinduzierten porösen Schichten mit zunehmender Fluenz (Bereich II) wird durch die in Abbildung 4.8 gezeigten cs-TEM-Aufnahmen einer mit $N_I = 4.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten Ge-Probe ersichtlich. In Abbildung 4.8a ist die komplexe, durch scharf definierte Übergänge gekennzeichnete Struktur des oberflächennahen Bereichs der Probe dargestellt und verdeutlicht den kompletten Schichtaufbau aus poröser Oberflächenschicht, amorpher Zwischenschicht, poröser vergrabener Schicht, vergrabener amorpher Schicht sowie den Übergang zum c-Ge-Substrat. Aus der vergrößerten Darstellung der vergrabenen, bereits auf $1.6 \mu\text{m}$ ausgedehnten porösen Struktur in Abbildung 4.8b geht hervor, dass diese aus unförmig orientierten blasenartigen Hohlräumen mit Dimensionen von einigen (10...100) nm besteht, die von ungefähr (5...8) nm dicken Ge-Wänden umschlossen sind. Die poröse Oberflächenschicht hingegen weist lediglich eine Ausdehnung von 540 nm auf und zeigt

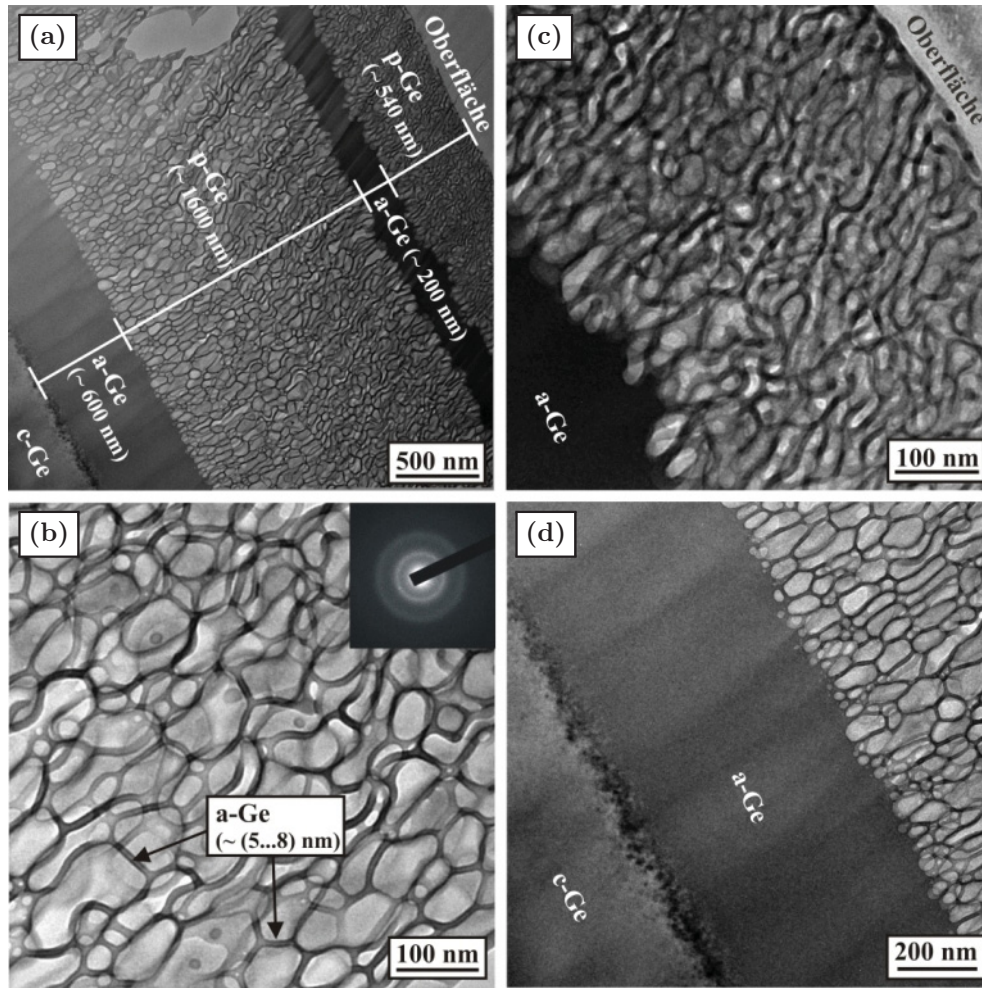


Abb. 4.8: Die cs-TEM-Aufnahme (a) zeigt die gesamte poröse Schichtstruktur einer mit 3 MeV I^{2+} -Ionen und $N_I = 4.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ bei RT und $\Theta = 7^\circ$ bestrahlten Ge-Probe. Zusätzlich sind vergrößerte cs-TEM-Aufnahmen der vergrabenen porösen Schicht inklusive Elektronenbeugungsbild (b), der porösen Oberflächenschicht (c) und von dem abrupten Übergang zwischen vergrabener poröser Schicht und vergrabener amorpher Schicht sowie dem Grenzbe- reich zum c-Ge-Substrat (d) dargestellt [196].

bei vergleichbaren Ge-Wandstärken und Hohlraumdimensionen eine gestreckte, bereits als schlauchförmig beschriebene Struktur (siehe Abb. 4.8c). Der Übergang zwischen der vergrabenen porösen Schicht und der darunter liegenden vergrabenen homogenen amorphen Schicht sowie die Grenze zum kristallinen Substrat sind in vergrößerter Darstellung in Abbildung 4.8d gezeigt, wobei die scharfe Grenze der porösen Schicht auf eine maximale Tiefe für die Entstehung von Hohlräumen unter den gegebenen experimentellen Bestrahlungsbedingungen hindeutet. Darüber hinaus verdeutlichen die an den dünnen Ge-Wänden mittels Elektronenbeugung ermittelten charakteristischen dif- fusen Beugungsringe (siehe Abb. 4.8b) den amorphen Charakter der Ge-Wände. Die an den 200 bzw. 600 nm dicken, hohlraumfreien Schichten ermittelten Beugungsmu- ster unterscheiden sich nicht von dem in Abbildung 4.8b gezeigten Beugungsbild. Diese Schichten sind somit ebenfalls vollständig amorph [196].

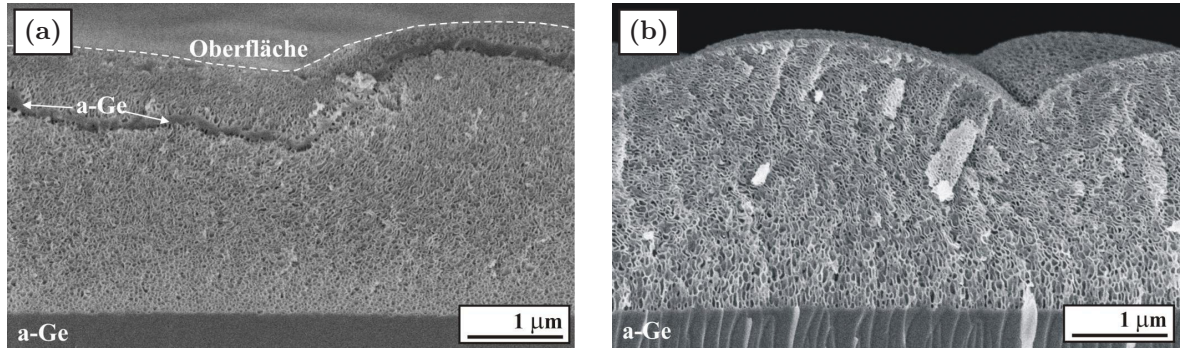


Abb. 4.9: Die cs-SEM-Aufnahmen einer mit 3 MeV I^{2+} -Ionen bestrahlten Ge-Probe bei RT und $\Theta = 7^\circ$ verdeutlichen den Zusammenschluss der durch eine amorphe Zwischenschicht separierten porösen Schichten (a, $N_I = 5.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) zu einer einzigen kontinuierlichen porösen Oberflächenschicht (b, $N_I = 7.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$). Zudem zeigt sich die nur bei $\Theta = 7^\circ$ und hohen Fluenzen auftretende hügelartige mikrometergroße Oberflächenstruktur [196].

Die Entwicklung der Strukturen im Übergang zu Bereich *III* wird durch die in Abbildung 4.9 dargestellten cs-SEM-Aufnahmen charakterisiert. In Abbildung 4.9a sind bei $N_I = 5.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ beide sich stetig mit wachsender Fluenz ausdehnenden porösen Schichten noch durch eine dünne a-Ge-Schicht voneinander getrennt, während in Abbildung 4.9b bei einer Fluenz von $N_I = 7.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ eine kontinuierliche, von der Probenoberfläche bis zur vergrabenen amorphen Schicht ausgedehnte poröse Schicht sichtbar ist. Bei hohen Fluenzen ist zudem die Bildung einer hügelartigen mikrometergroßen Oberflächenstruktur zu beobachten.

Relative Dichteänderung infolge Hohlraumformierung

Unabhängig von den Bestrahlungsbedingungen wurden die in den Abbildungen 4.6 bis 4.9 beschriebenen ionenstrahlinduzierten Strukturumwandlungen für jede mit I-Ionen bestrahlte Ge-Probe nachgewiesen. Eine Zusammenfassung aller aus cs-EM-Analysen gewonnenen Daten über die Entstehung der einzelnen porösen und amorphen Schichten sowie deren fluenzabhängige Ausdehnung ist in Abbildung 4.10 am Beispiel der RT-Bestrahlung von Ge mit 3 MeV I-Ionen unter $\Theta = 7^\circ$ dargestellt. Der Vergleich mit der mittels Oberflächenprofilometrie ermittelten Volumenausdehnung Δz (siehe Abb. 4.10) zeigt, dass das fluenzabhängige Verhalten von Δz im Bereich *I* mit der mit wachsender Fluenz zunehmenden Ausdehnung der porösen Oberflächenschicht korreliert. Im Bereich *II* hingegen wird Δz durch die Bildung vergrabener Hohlräume dominiert, d.h. der Anstieg von Δz bzw. der Gradient γ_{II} wird im Wesentlichen durch die rapide Ausdehnung der neu gebildeten vergrabenen porösen Schicht bestimmt. Die anfänglich ungefähr 725 nm dicke hohlraumfreie amorphe Zwischenschicht verkleinert sich dabei durch die Ausdehnung beider poröser Schichten stetig, bis sie schließlich bei hohen Fluenzen infolge der Vereinigung zu einer einzigen porösen Schicht verschwindet [196].

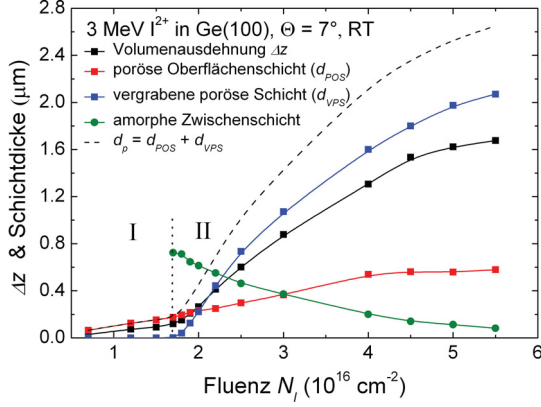


Abb. 4.10: Fluenzabhängiger Verlauf der aus EM-Analysen ermittelten porösen und amorphen Schichtdicken und der aus Oberflächenprofilometrie ermittelten Ausdehnung.

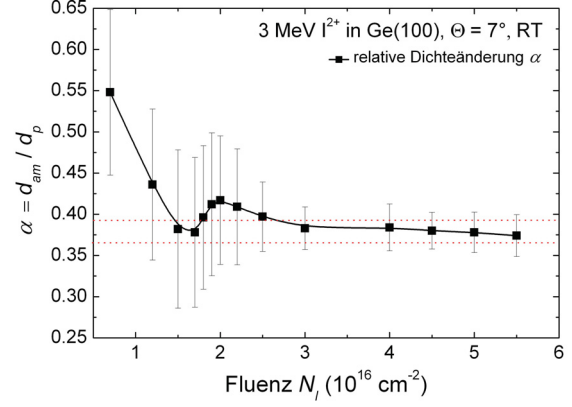


Abb. 4.11: Fluenzabhängige Darstellung der relativen Dichteänderung $\alpha = d_{am}/d_p$ am Beispiel der Bestrahlung von c-Ge mit 3 MeV I^{2+} -Ionen bei RT und $\Theta = 7^\circ$ [196].

Anhand der in Abbildung 4.10 aufgetragenen Daten kann eine Abschätzung der relativen Dichteänderung $\alpha(N_I) = d_{am}(N_I)/d_p(N_I)$ erfolgen, wobei sich d_{am} auf die Dicke des amorphen Materials bezieht, das infolge der Ionenbestrahlung in eine poröse Schicht der Dicke d_p ($d_p = d_{POS} + d_{VPS}$, siehe Abb. 4.10) umgewandelt wird [196]. Da die hohlrauminduzierte Volumenexpansion lateral (x-, y-Richtung) durch die den bestrahlten Bereich umgebende c-Ge-Matrix mechanisch eingeschränkt ist, resultiert fernab dieses Randbereichs die Volumenexpansion nahezu vollständig in einer vertikalen Volumenausdehnung und ermöglicht eine Abschätzung des Parameters d_{am} mittels hohlrauminduzierter Volumenausdehnung Δz_p über die Beziehung $d_{am} = d_p - \Delta z_p$. Die bei niedrigen Fluenzen nicht zu vernachlässigende induzierte Aufwölbung infolge der Amorphisierung (z.B. $\Delta z^{am}/\Delta z \approx 20\%$ bei $N_I = 1.7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) wird dabei durch die Relation $\Delta z_p = \Delta z - \Delta z^{am}$ berücksichtigt. Die für eine $1.5 \text{ } \mu\text{m}$ dicke amorphe Schicht (siehe Abb. 4.6b) zu erwartende Aufwölbung infolge der ionenstrahlinduzierten Dichteänderung $\Delta\rho$ (siehe Kap. 4.1.1.2) beträgt $\Delta z^{am} = \Delta\rho \times d_{am} = 3.2\% \times 1.5 \text{ } \mu\text{m} \approx 48 \text{ nm}$. Der komplementäre Prozess des Materialabtrags durch ionenstrahlinduzierte Sputterprozesse führt bei einer Fluenz von $N_I = 1.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ lediglich zu einem Abtrag von $\Delta z_s = -8 \text{ nm}$ (Sputterrate $r_s = 3.41$ Atome pro Ion, SRIM2008 [66, 67]). Im Vergleich zu Δz^{am} ist demnach der sputterinduzierte Materialabtrag Δz_s im Fluenzbereich $N_I = (0.1 \dots 3.0) \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ zu vernachlässigen ($|\Delta z_s| < \Delta z^{am}$). In diesem Fluenzbereich wird daher die relative Dichteänderung wie folgt berechnet: $\alpha = 1 - \frac{\Delta z - \Delta z^{am}}{d_p}$. Für Fluenzen $N_I > 3.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ heben sich beide Prozesse aufgrund ihres komplementären Charakters gegenseitig auf, so dass $\Delta z^{am} - |\Delta z_s|$ innerhalb der experimentellen Messgenauigkeit vernachlässigbar klein im Vergleich zu den gemessenen Volumenausdehnungen mit Werten von $\Delta z \sim \mu\text{m}$ ist. In diesem Fall wird die relative Dichteänderung über die Relation $\alpha = 1 - \frac{\Delta z}{d_p}$ berechnet [196].

Der auf diese Weise abgeschätzte und in Abbildung 4.11 über der Fluenz aufgetragene Parameter α nimmt mit zunehmender Bestrahlung rapide ab und strebt oberhalb einer Fluenz von $N_I = 3.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ einen nahezu konstanten Wert im Bereich $\alpha = 0.37$ an [196]. Die für kleine Fluenzen sehr großen Fehlerbalken sind auf die großen relativen Fehler Δ bei der Bestimmung der Volumenausdehnungen ($\Delta(\Delta z)/\Delta z \approx 10\%$) sowie bei der auf den cs-EM-Analysen basierenden Schichtdickenbestimmungen der anfänglich sehr dünnen porösen Schichten ($\Delta d_p/d_p \approx 15\%$) zurückzuführen. Der leichte Anstieg von α im Fluenzbereich von $N_I = (1.7 \dots 2.0) \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, d.h. beim Übergang von Bereich *I* zu *II*, kann ebenfalls durch eine fehlerhafte Bestimmung der Schichtdicke d_p der neu formierten vergrabenen porösen Schicht erklärt werden. Offensichtlich wurden die Schichtdicken d_p von sehr dünnen „porösen“ Schichten, bestehend aus lediglich einzelnen kleinen Hohlräumen, überschätzt (vgl. Abb. 4.7). Die bei allen Bestrahlungsbedingungen beobachtete relative Volumenausdehnung um den Faktor 2.7 ($d_p = 2.7 \times d_{am}$) verdeutlicht die Homogenität des zugrunde liegenden Mechanismus. Zudem weisen die cs-EM-Analysen auf die Erzeugung stabiler und reproduzierbarer, die Hohlräume umgebende Ge-Wände hin, deren Wandstärken eine minimale Dicke von (5...8) nm nicht unterschreiten. Somit sind die in Bereich *III* mit fortlaufender Bestrahlung zunehmende Volumenausdehnung (vgl. Abb. 4.4) und die leichte Verringerung von α (vgl. Abb. 4.11) nicht auf eine weitere Reduzierung der Ge-Wandstärken zurückzuführen, sondern basieren vielmehr auf einem kontinuierlichen Zusammenschluss sich stetig vergrößernder Hohlräume. Die in der Literatur für GaSb und InSb beschriebene ionenstrahlinduzierte Erzeugung von netzwerkartigen porösen Strukturen (vgl. Kap. 2.4 und [185–188, 190, 191]) konnte unter diesen Bestrahlungsbedingungen und den untersuchten Fluenzbereichen in Ge jedoch nicht nachgewiesen werden [196].

Winkelabhängige morphologische Modifikation der Probenoberfläche

Im Vergleich zu den kristallinen Ausgangsproben (c-Ge), deren Oberfläche atomar flach und strukturlos ist, weisen die in pv-SEM-Geometrie untersuchten Proben sowohl für Bestrahlung mit Fluenzen im Bereich *I* (Abb. 4.12a, $N_I = 1.2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) als auch im Bereich *II* (Abb. 4.12b, $N_I = 2.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) eine poröse Struktur an der Probenoberfläche auf, deren Krater und Wandstärken Durchmesser von einigen Nanometern haben. Die Krater entsprechen den offenen Enden der in den Abbildungen 4.6 und 4.8 im Querschnitt als schlauchförmig klassifizierten Hohlräumen. Während sich die Krater mit zunehmender Bestrahlung stetig senkrecht zur Probenoberfläche vertiefen (vgl. Abb. 4.6), wird keine substantielle strukturelle Veränderung der nanoporösen Oberflächenstruktur in lateraler Richtung beobachtet (vgl. Abb. 4.12a und b) [196].

Wie in Abbildung 4.5 gezeigt und in Tabelle 4.1 beschrieben, ändert sich die visuelle Erscheinung der Probenoberfläche für die Bestrahlungen unter $\Theta = 7^\circ$ im Bereich

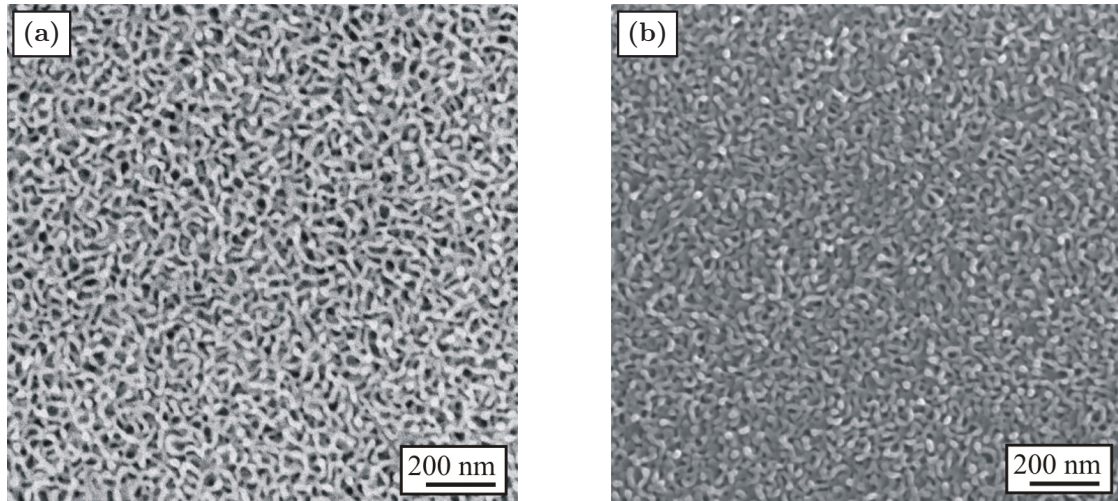


Abb. 4.12: Die pv-SEM-Aufnahmen einer mit 3 MeV I^{2+} -Ionen bestrahlten Ge-Probe bei RT und $\Theta = 7^\circ$ zeigen sowohl für eine Fluenz von $N_I = 1.2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (a, Bereich I) als auch für $N_I = 2.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (b, Bereich II) die Formierung einer ähnlichen netzwerkartigen, nanometergroßen Struktur an der Probenoberfläche [196].

III, was auf eine weitere massive Strukturmodifikation der Probenoberfläche zurückzuführen ist. Bereits in den in Abbildung 4.9 dargestellten cs-SEM-Aufnahmen ist die Bildung einer hügelartigen Oberflächenstruktur mit vertikalen Dimensionen von (200...700) nm zu beobachten. Dass sich die in lateraler Richtung einige Mikrometer ausgedehnte Oberflächenstruktur über die gesamte bestrahlte Probenoberfläche erstreckt, wird aus der in Abbildung 4.13 dargestellten pv-SEM-Aufnahme ersichtlich. Diese hügelartige Struktur, im Folgenden als Makrostruktur bezeichnet, ist reproduzierbar, sehr stabil und zeigt nach Abschluss der Entstehung im untersuchten Fluenzbereich keine weitere Strukturänderung. Der vergrößerte Ausschnitt in Abbildung 4.13 zeigt die ionenstrahlinduzierte nanoporöse Struktur an der Oberfläche, die sich in ihrer Dimension nicht von den in Bereich I und II ermittelten Strukturen (siehe Abb. 4.12) unterscheidet [196].

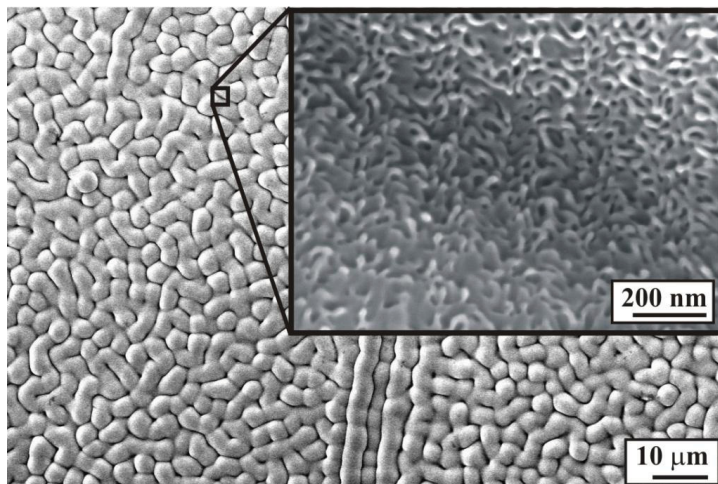


Abb. 4.13: Pv-SEM-Aufnahme einer mit 3 MeV I^{2+} -Ionen und $N_I = 5.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten Ge-Probe bei RT und $\Theta = 7^\circ$ (Bereich III). Die Probenoberfläche ist charakterisiert durch eine Überlagerung aus einer mikrometergroßen, hügelartigen Struktur und der bereits in Abbildung 4.12 beschriebenen nanoporösen Oberflächenstruktur [196].

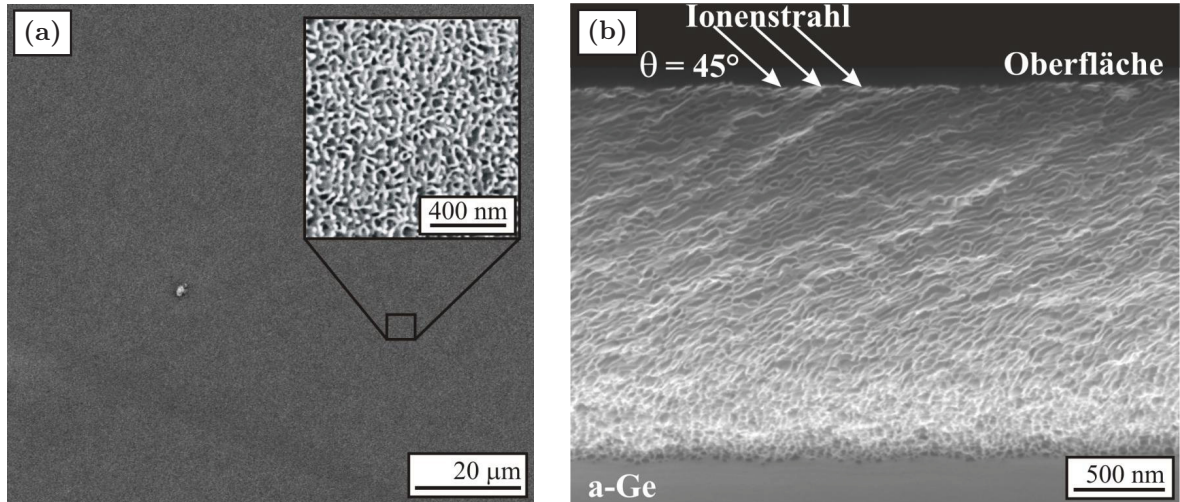


Abb. 4.14: SEM-Aufnahmen einer mit 3 MeV I^{2+} -Ionen und Fluenzen im Bereich *III* bestrahlten Ge-Probe bei RT und $\Theta = 45^\circ$. Die pv-SEM-Aufnahme (a) weist die Existenz einer nanoporösen Oberflächenstruktur nach, zeigt aber im Gegensatz zur Bestrahlung unter 7° keine Makrostruktur. In der cs-SEM-Aufnahme (b) wird eine definierte Ausrichtung der porösen Schicht in Richtung der Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche deutlich [196].

Dieser für den Einfallswinkel $\Theta = 7^\circ$ beschriebene Effekt der Formierung einer Makrostruktur an der Probenoberfläche unterscheidet sich wesentlich von der beobachteten Strukturmodifikation für unter $\Theta = 45^\circ$ bestrahlten Ge-Proben. Unter 45° -Bestrahlung erfolgt im Bereich *III* keine weitere optische Veränderung der Probenoberfläche (vgl. Tab. 4.1). Die in Abbildung 4.14 dargestellten pv- und cs-SEM-Aufnahmen einer unter $\Theta = 45^\circ$ bestrahlten Ge-Probe verdeutlichen, dass sich über den gesamten Fluenzbereich (Bereich *I* bis *III*) eine strukturell, den unter $\Theta = 7^\circ$ bestrahlten Proben ähnliche nanoporöse Oberflächenstruktur (vgl. vergrößerte pv-SEM-Aufnahme in Abb. 4.14a mit Abb. 4.12), jedoch keine Makrostruktur gebildet hat. Vielmehr zeigt sich in der repräsentativen cs-SEM-Aufnahme in Abbildung 4.14b eine definierte Ausrichtung der porösen Schicht in Richtung der Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche. Die in Abhängigkeit vom Einfallswinkel unterschiedlichen induzierten Strukturmodifikationen deuten auf zwei verschiedene Bildungsprozesse hin, die als vollständig unabhängig von der ionenstrahlinduzierten Formierung von Hohlräumen bzw. der Formierung poröser Schichten anzunehmen sind [196].

In Abbildung 4.15 ist die aus AFM-Messungen ermittelte mittlere Oberflächenrauigkeit R_a als Funktion der Fluenz für die unter verschiedenen Einfallswinkeln ($\Theta = 7^\circ$ und 45°) bestrahlten c-Ge-Proben aufgetragen. Ausgehend von unbestrahltem Ge mit einer atomar flachen Probenoberfläche ($R_a < 1$ nm) vergrößert sich die mittlere Oberflächenrauigkeit nahezu unabhängig vom Einfallswinkel auf einen maximalen Wert von $R_a \approx 5.2$ nm. Für Fluenzen im Bereich *II* ($N_I > 1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) sinkt R_a innerhalb der experimentellen Messgenauigkeit nur leicht und erreicht für hohe Fluenzen im Bereich *III* einen Wert von $R_a \approx 4$ nm. Mit Erreichen des maximalen Wertes

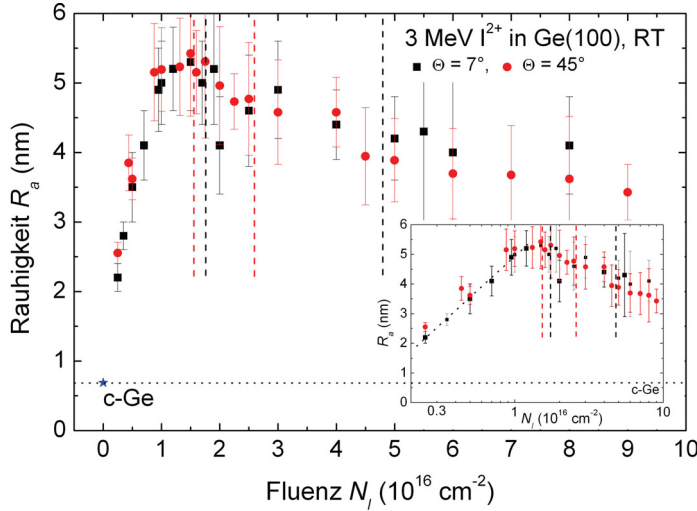


Abb. 4.15: Aus AFM-Messungen ermittelte mittlere Oberflächenrauigkeit R_a als Funktion der Fluenz N_I für die bei Raumtemperatur mit 3 MeV I^{2+} -Ionen unter einem Einfallswinkel von $\Theta = 7^\circ$ und 45° bestrahlten c-Ge-Proben. Die drei Bereiche sind jeweils durch die gestrichelten Linien für $\Theta = 7^\circ$ (Schwarz) und $\Theta = 45^\circ$ (Rot) angedeutet [196].

von R_a ist die ionenstrahlinduzierte Modifizierung der Probenoberfläche noch vor der Bildung von vergrabenen Hohlräumen (erste rote und schwarze gestrichelte Linie in Abb. 4.15) abgeschlossen. Die Bildung von vergrabenen porösen Schichten und deren Zusammenschluss mit der porösen Oberflächenschicht haben keinen Einfluss auf die Oberflächenrauigkeit. Die leichte Reduzierung von R_a kann durch den Prozess der Ionenstrahlglättung infolge winkelselektiver Sputtererosion an den porösen Oberflächen erklärt werden [202]. Da mittels polynomielltem Fit 2. Grades den Messungen überlagerte Informationen (z.B. Probenkrümmung, Probe verkippt, usw.) herausgerechnet wurden und die Kantenlänge des vermessenen Gebiets lediglich $1 \mu\text{m}$ beträgt, ist die bei $\Theta = 7^\circ$ auftretende Makrostruktur in Abbildung 4.15 nicht sichtbar. Unabhängig von Θ zeigt sich somit ein identisches fluenzabhängiges Verhalten mit vergleichbaren Werten von R_a . Die entstandenen nanoporösen Oberflächen sind demnach strukturell gleich, was in guter Übereinstimmung mit den pv-SEM-Analysen ist (vgl. Abb. 4.12 und 4.13 mit 4.14a). Die in diesen Experimenten ermittelten Werte von R_a stimmen mit den Ergebnissen von Kaiser et al. überein [179] und bestätigen den in Bereich I gefundenen linearen Anstieg von R_a bei logarithmischer Darstellung der Fluenzskala [196].

Die effektive fluenzabhängige Verfärbung der Probenoberfläche kann nun eindeutig auf die steigende Oberflächenrauigkeit $R_a(N_I)$ zurückgeführt werden, da das einfallende Licht mit zunehmender Fluenz vermehrt diffus in die nahezu senkrecht zur Oberfläche orientierten Hohlräume (vgl. Abb. 4.6) reflektiert wird. Dies führt im Bereich I zu einer fast vollständigen Absorption des einfallenden Lichts, wodurch die bestrahlten Bereiche der Ge-Proben zunehmend dunkler erscheinen. Bei hohen Fluenzen und einem Einfallswinkel von $\Theta = 7^\circ$ kommt es infolge einer weiteren Modifikation der Probenoberfläche durch die Bildung einer Makrostruktur zu statistisch zur Probenoberfläche orientierten nanoporösen Hohlräumen. Das einfallende Licht wird nun stochastisch in alle Richtungen gestreut, was in einer als matt und silberglänzend erscheinenden Probenoberfläche resultiert.

4.1.2.2 Hohlraumformierung in Abhängigkeit von der Bestrahlungstemperatur

Wie bereits in der Literatur beschrieben (siehe Kap. 2.3.2.2 und [49, 51, 53]) hat die Bestrahlungstemperatur und damit die thermisch induzierte Defektmobilität einen großen Einfluss auf den Prozess der Hohlraumbildung. Im Folgenden wird dies anhand von LNT-Bestrahlungen unter gleichen experimentellen Bedingungen ($E = 3$ MeV I-Ionen, $\Theta = 7^\circ$ und 45°) untersucht.

A) Vertikale Volumenausdehnung

Die ionenstrahlinduzierte vertikale Volumenausdehnung von Ge infolge LNT-Bestrahlung ist in Abbildung 4.16a als Funktion der Fluenz aufgetragen. Der Vergleich mit der ebenfalls in Abbildung 4.16a dargestellten vertikalen Volumenausdehnung bei RT-Bestrahlung (vgl. Kap. 4.1.2.1, Abschnitt A) verdeutlicht sowohl für den fluenzabhängigen Verlauf $\Delta z(N_I)$ als auch für die absoluten Werte der Volumenausdehnung Δz substantielle Unterschiede [196]. Im Fluenzbereich $N_I \leq 2.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ beträgt die bei LNT-Bestrahlung induzierte Volumenausdehnung Δz^{LNT} lediglich (20...40) nm. Die an diesen Proben durchgeführten RBS/C- und EM-Untersuchungen zeigen die ionenstrahlinduzierte Bildung einer homogenen amorphen Oberflächenschicht, jedoch keine Bildung von Hohlräumen oder porösen Schichten. Folglich ist die in diesem Fluenzbereich gemessene geringe Volumenexpansion allein auf die durch Amorphisierung induzierte Volumenausdehnung Δz^{am} zurückzuführen. Eine auf Hohlraumformierung basierende Volumenausdehnung wird bei LNT-Bestrahlungen unter $\Theta = 7^\circ$ und 45° erst für Fluenzen $N_I > 2.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ nachgewiesen. Im Fall der Bestrahlung unter $\Theta = 7^\circ$ steigt die Volumenausdehnung kontinuierlich mit zunehmender Fluenz an und

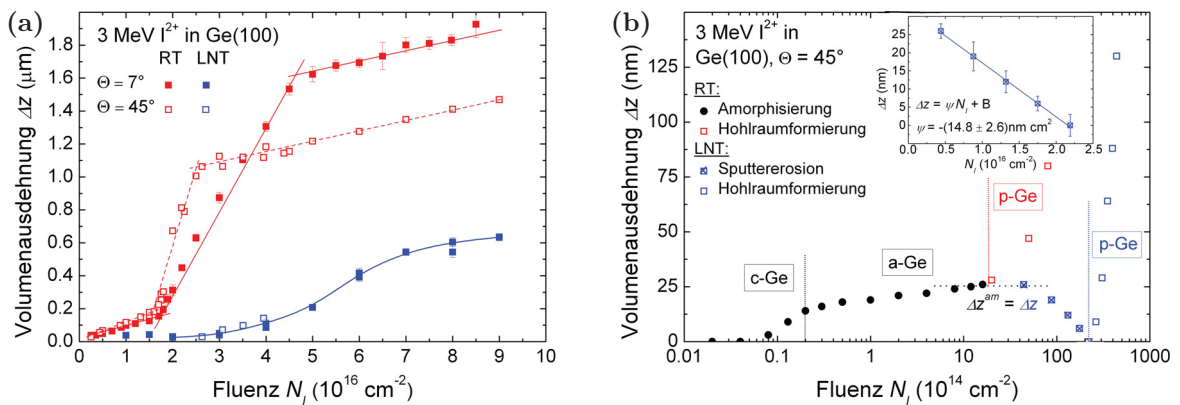


Abb. 4.16: Aus Oberflächenprofilometrie-Messungen ermittelte mittlere vertikale Volumenausdehnung Δz als Funktion der Fluenz N_I für die bei Raum- und Tieftemperatur mit 3 MeV I^{2+} -Ionen unter $\Theta = 7^\circ$ und 45° bestrahlten c-Ge-Proben (a). Die zur Volumenausdehnung beitragenden ionenstrahlinduzierten Effekte (Amorphisierung, Sputtererosion und Hohlraumformierung) werden für die LNT-Bestrahlung unter $\Theta = 45^\circ$ in (b) deutlich [196].

erreicht eine maximale Volumenausdehnung von $\Delta z^{LNT} \approx 600$ nm. Im gesamten untersuchten Fluenzbereich ist die bei LNT-Bestrahlung induzierte Volumenausdehnung deutlich kleiner als bei RT-Bestrahlung (siehe Abb. 4.16a). Eine dem fluenzabhängigen Verlauf von $\Delta z^{LNT}(N_I)$ entsprechende Änderung der visuellen Erscheinung der bestrahlten Probenoberflächen wurde nicht beobachtet. Die Probenoberflächen bleiben für den gesamten untersuchten Fluenzbereich silberglänzend, werden aber für die Bestrahlung unter $\Theta = 7^\circ$ und bei Fluenzen $N_I \geq 6.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ ähnlich den bei RT und $\Theta = 7^\circ$ bestrahlten Ge-Proben (vgl. Tab. 4.1) zunehmend matter [196].

Abbildung 4.16b zeigt die ionenstrahlinduzierte Volumenausdehnung infolge der Bestrahlung von c-Ge-Proben unter $\Theta = 45^\circ$ über einen großen Fluenzbereich, wobei alle zur Volumenausdehnung beitragenden ionenstrahlinduzierten Effekte durch die logarithmische Darstellung der Fluenzskala deutlich werden. Bis zu einer Fluenz von $N_I = 2.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ dominiert die durch Amorphisierung induzierte Volumenausdehnung $\Delta z^{am} \approx 25$ nm (vgl. Kap. 4.1.1.2). Während für die RT-Bestrahlung mit zunehmender Fluenz eine deutlich ansteigende Volumenausdehnung infolge Hohlraumformierung zu beobachten ist (offene rote Vierecke), zeigt sich bei der LNT-Bestrahlung im Fluenzbereich $N_I = (0.5 \dots 2.5) \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ eine mit wachsender Fluenz linear abnehmende Volumenausdehnung, d.h. es erfolgt ein effektiver Materialabtrag. Aus der linearen Regression (siehe Einschub in Abb. 4.16b) wird ein negativer Anstieg ψ ermittelt, woraus folgt, dass Δz pro einer Fluenz von $N_I = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ um $-(14.8 \pm 2.6)$ nm abnimmt. Der Vergleich mit dem mittels SRIM2008 berechneten sputterinduzierten Materialabtrag $\Delta z_s(N_I = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}) = -15.6$ nm zeigt, dass der beobachtete ionenstrahlinduzierte Materialabtrag allein auf dem Prozess der Sputtererosion basiert. Diese Ergebnisse bestätigen den in Kapitel 4.1.2.1 diskutierten geringen Einfluss des Sputterprozesses, da in Abbildung 4.16 die Volumenausdehnung Δz für Fluenzen $N_I < 3.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ immer positiv ist und somit stets $\Delta z^{am} > |\Delta z_s|$ gilt [196].

B) Elektronenmikroskopische Charakterisierung

Repräsentative cs-SEM-Aufnahmen der unter $\Theta = 7^\circ$ bei LNT bestrahlten Ge-Proben sind in Abbildung 4.17 dargestellt. Anhand der in Abbildung 4.17a gezeigten Probe wird deutlich, dass im Gegensatz zu den RT-Bestrahlungen (vgl. Abb. 4.6 und 4.8) keine poröse Schicht an der Probenoberfläche entstanden ist. Der oberflächennahe Bereich ist nach wie vor durch eine homogene amorphe Schicht ohne Einschlüsse oder Poren gekennzeichnet, was die über einen großen Fluenzbereich unveränderte silberglänzende Probenoberfläche erklärt. Die bei Fluenzen von $N_I \approx 3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ einsetzende Volumenexpansion kann eindeutig der Formierung von vergrabenen Hohlräumen zugeordnet werden, wobei die Hohlräume genau wie bei RT-Bestrahlung in der Tiefe um R_p entstanden sind [196]. Mit fortwährender Bestrahlung steigt die Anzahl und Dichte

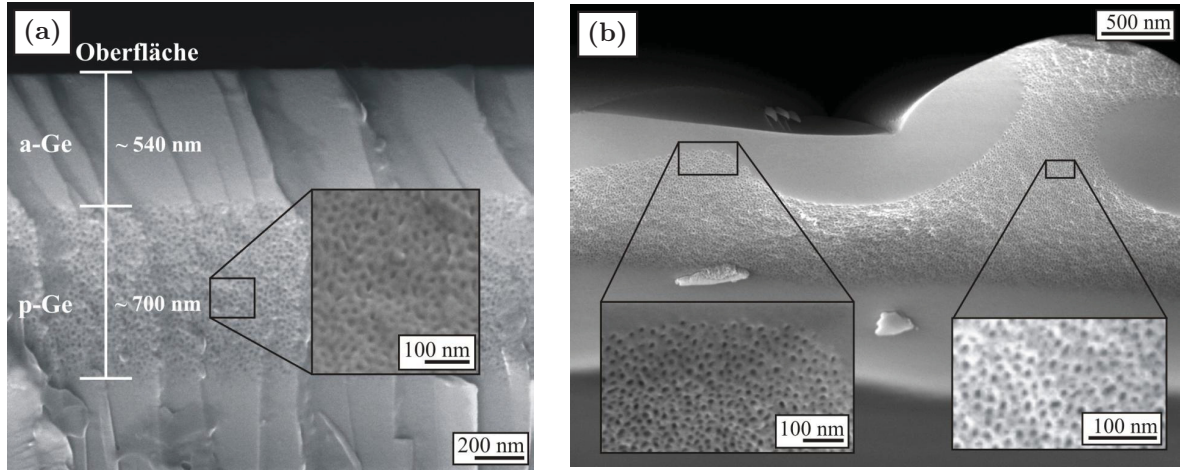


Abb. 4.17: Cs-SEM-Aufnahmen einer mit 3 MeV I^{2+} -Ionen bestrahlten Ge-Probe bei LNT und $\Theta = 7^\circ$ mit $N_I = 5.0$ (a) und $8.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (b). Die Bildung vergrabener sphärischer Hohlräume innerhalb der homogenen a-Ge-Schicht führt zur Formierung einer scharf definierten, vergrabenen porösen Schicht (a), während die Entstehung einer Makrostruktur die Bildung oberflächennaher Hohlräume bei hohen Fluenzen bewirkt (b) [196].

der annähernd sphärischen Hohlräume an. Dies führt zur Bildung einer scharf definierten, parallel zur Probenoberfläche orientierten vergrabenen porösen Schicht (siehe Abb. 4.17a). Die Hohlräume selbst bleiben bis zu den höchsten untersuchten Fluenzen annähernd sphärisch mit nahezu unverändertem Durchmesser von (10...30) nm. Der bei RT-Bestrahlungen beobachtete Zusammenschluss von einzelnen Nanoporen zu größeren unförmigen Hohlräumen wurde bei LNT-bestrahlten Proben nicht verifiziert. Die dimensionsmäßig kleineren und stets separierten Hohlräume sowie die Unterdrückung der Formierung einer porösen Oberflächenschicht führen zu der bei LNT-Bestrahlung kleineren vertikalen Volumenausdehnung (vgl. Abb. 4.16a) [196].

Die in Abbildung 4.18 gezeigten pv-SEM-Aufnahmen verdeutlichen für die Bestrahlung unter $\Theta = 7^\circ$ den Beginn der Bildung einer mikrometergroßen Oberflächenstruktur

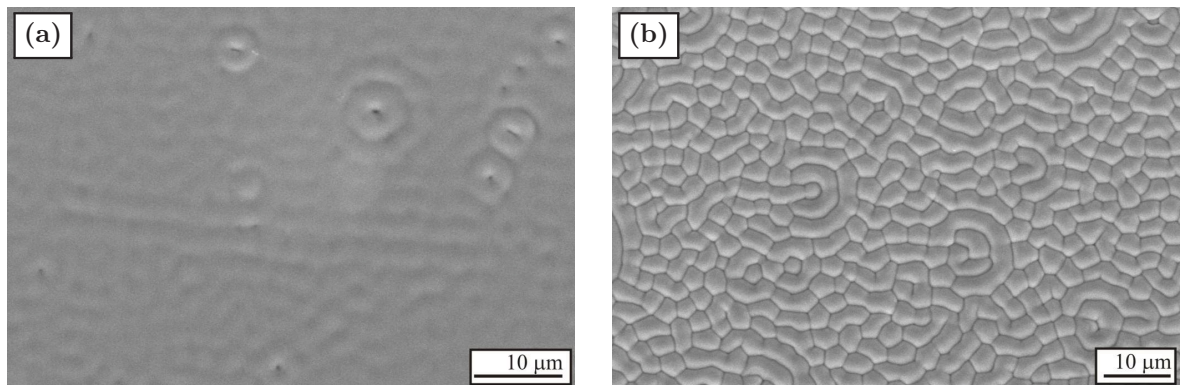


Abb. 4.18: Pv-SEM-Aufnahmen einer mit 3 MeV I^{2+} -Ionen bestrahlten Ge-Probe bei LNT und $\Theta = 7^\circ$ mit $N_I = 5.0$ (a) und $8.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (b). In (a) ist die Entstehung einer mikrometergroßen hügelartigen Struktur sichtbar, aus der sich mit steigender Fluenz die charakteristische Makrostruktur herausbildet (b).

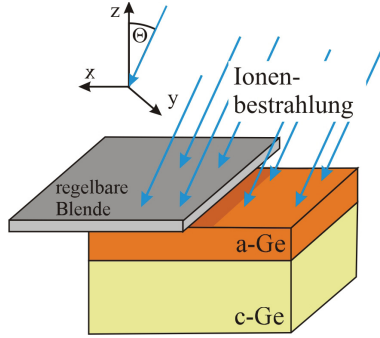


Abb. 4.19: Bestrahlungsgeometrie bei LNT-Bestrahlung: Blende senkrecht orientiert zur Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche.

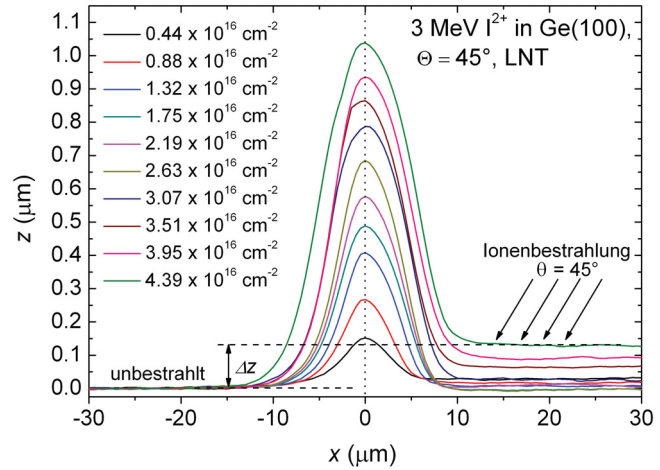


Abb. 4.20: Aus Oberflächenprofilometrie-Messungen ermittelte Höhenprofile einer mit 3 MeV I^{2+} -Ionen bei LNT und $\Theta = 45^\circ$ bestrahlten c-Ge-Probe um den Grenzbereich der Blende ($x = 0$) [196].

bei einer Fluenz von $N_I = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (a), die bei weiterer Bestrahlung sowohl im Profil (siehe Abb. 4.17b) als auch in der lateralen Dimension (siehe Abb. 4.18b) kongruent mit der für RT-Bestrahlungen beschriebenen Makrostruktur ist (vgl. Abb. 4.13) [196]. Die Modifikation der Probenoberfläche bewirkt eine ionenstrahlinduzierte Formierung von Hohlräumen innerhalb der hügeligen Struktur und direkt an der Probenoberfläche (siehe Abb. 4.17b). Aus den experimentellen Ergebnissen kann geschlussfolgert werden, dass die Entstehung einer Makrostruktur unabhängig von der Bildung einer porösen Oberflächenschicht ist, was die Annahme eines von der Hohlraumformierung unabhängigen Bildungsprozesses bestärkt. Die für hohe Fluenzen zunehmend matt wirkende Probenoberfläche kann ebenfalls wie bei RT-Bestrahlung (siehe Kap. 4.1.2.1) auf die in diesem Fluenzbereich induzierte Makrostruktur zurückgeführt werden.

Bei LNT-Bestrahlungen unter $\Theta = 45^\circ$ wurde ebenfalls für $N_I \geq 2,6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ eine poröse Schicht in der Tiefe der projizierten Ionenreichweite nachgewiesen, jedoch sind aufgrund der niedrigen Endfluenzen von $N_I = 4,4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ keine Aussagen zur Modifikation der Probenoberfläche infolge Hochfluenzbestrahlungen möglich. Eine bereits bei der kleinsten Fluenz beobachtbare signifikant vom Einfallswinkel abhängige Modifikation der Probenoberfläche im Übergangsbereich bestrahlt-unbestrahlt konnte aufgrund einer gezielt veränderten Bestrahlungsgeometrie, bei der die Blende senkrecht zur Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche montiert war (siehe Abb. 4.19), dennoch festgestellt werden. In Abbildung 4.20 sind die mittels Oberflächenprofilometrie gemessenen Höhenprofile der unter $\Theta = 45^\circ$ mit verschiedenen Fluenzen bestrahlten Ge-Proben dargestellt. In Verbindung mit den TEM-Analysen zeigt sich, dass die bis zu einer Fluenz von $N_I = 2,6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten Proben eine

Tab. 4.2: Aufgelistet sind die aus den Höhenprofilen (siehe Abb. 4.20) bestimmten Werte des Wall-Querschnitts F_W und der maximalen vertikalen Volumenausdehnung des Walls Δz_W^{max} für die Bestrahlung von a-Ge mit $E = 3$ MeV I^{2+} -Ionen bei LNT und $\Theta = 45^\circ$.

N_I (10^{16} cm^{-2})	F_W (μm^2)	Δz_W^{max} (μm)	N_I (10^{16} cm^{-2})	F_W (μm^2)	Δz_W^{max} (μm)
0.44	1.08	0.144	2.63	5.63	0.685
0.88	1.81	0.268	3.07	7.27	0.787
1.32	2.96	0.373	3.51	8.15	0.864
1.75	3.93	0.480	3.95	9.11	0.936
2.19	4.65	0.577	4.39	10.97	1.038

stabile hohlraumfreie amorphe Oberflächenschicht mit einer geringen Volumenausdehnung aufweisen (siehe auch Abb. 4.16). Der Grenzbereich bestrahlt-unbestrahlt bei $x = 0$ ist durch eine ausgedehnte Wallstruktur gekennzeichnet, die sich mit zunehmender Fluenz nahezu symmetrisch vergrößert. Fernab des Grenzbereichs, d.h. für $x \gg 0$, wird die hohlrauminduzierte Volumenausdehnung Δz für hohe Fluenzen deutlich (vgl. Abb. 4.20). Die integrierten Wall-Querschnitte F_W sowie die maximalen vertikalen Volumenausdehnungen des Walls Δz_W^{max} sind in Tabelle 4.2 zusammengefasst. Bei LNT-Bestrahlungen unter 7° ist für alle mit $N_I < 3.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten Ge-Proben, bei denen weder die Formierung von Hohlräumen noch die Bildung einer Makrostruktur nachgewiesen wurde, keine wallartige Deformation bei $x = 0$ nachweisbar [196].

4.1.2.3 Hohlraumformierung in Abhängigkeit von der Ionenart

1) LEI-Bestrahlungen mit Energien im Bereich einiger MeV

Der Einfluss der Ionenart auf die ionenstrahlinduzierte Formierung von vergrabenen Hohlräumen in der Tiefe der projizierten Ionenreichweite soll im Folgendem durch RT-Bestrahlungen ($\Theta = 7^\circ$) von c-Ge-Proben mit Ag- und Au-Ionen differenzierter untersucht werden. Die kinetische Energie der Ag- und Au-Ionen wurde so angepasst, dass, verglichen mit der Bestrahlung mit 3 MeV I-Ionen unter $\Theta = 7^\circ$, die maximalen Eindringtiefen $R_{max}^{Ag,I,Au} \approx 1 \mu\text{m}$ und damit die Dicke des amorphisierten Materials d_{am} , das infolge der Ionenbestrahlung in eine poröse Schicht umgewandelt wird, für alle verwendeten Ionen (Ag, I, Au) nahezu identisch sind.

A) Vertikale Volumenausdehnung

Die Bestrahlung von c-Ge-Proben mit 2.5 MeV Ag- und 4.5 MeV Au-Ionen bewirkt eine Volumenausdehnung infolge der Amorphisierung von $\Delta z^{am} \approx (35 \dots 40) \text{ nm}$. Unabhängig von der Ionenart wird für Fluenzen $N_I > 2.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ in guter Über-

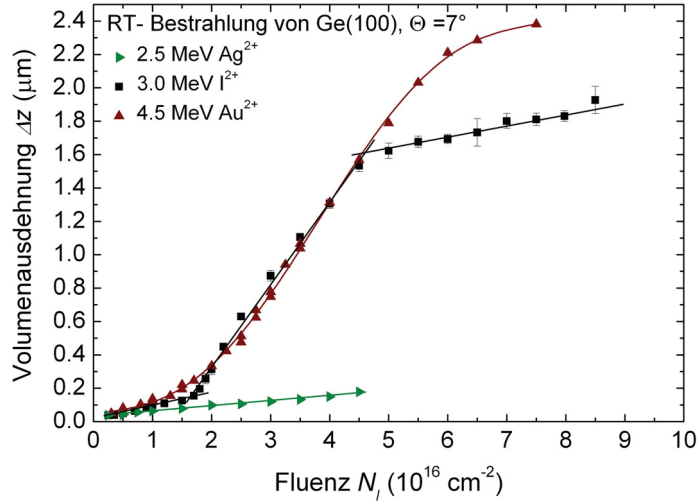


Abb. 4.21: Aus Oberflächenprofilometrie-Messungen ermittelte mittlere vertikale Volumenausdehnung Δz als Funktion der Fluenz N_I für die bei RT mit 2.5 MeV Ag^{2+} - und 4.5 MeV Au^{2+} -Ionen unter $\Theta = 7^\circ$ bestrahlten c-Ge-Proben. Zum Vergleich ist die ionenstrahlinduzierte Volumenausdehnung der unter 7° mit 3 MeV I^{2+} -Ionen bestrahlten c-Ge-Proben gezeigt [196].

einstimmung mit der einsetzenden charakteristischen Verfärbung der Probenoberfläche eine vertikale Volumenausdehnung $\Delta z > \Delta z^{am}$ nachgewiesen. In Abbildung 4.21 ist der fluenzabhängige Verlauf von $\Delta z(N_I)$ für die Bestrahlung mit Ag- und Au-Ionen im Vergleich zu der bereits in Kapitel 4.1.2.1 diskutierten 3 MeV Bestrahlung mit I-Ionen dargestellt [196]. Die Bestrahlung von Ge mit Ag-Ionen resultiert im gesamten untersuchten Fluenzbereich in einem linearen Anstieg von Δz , erreicht aber für die höchste bestrahlte Fluenz von $N_I = 4.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ lediglich eine Volumenexpansion von $\Delta z = 180 \text{ nm}$. Ein Übergang zu Bereich II konnte nicht verifiziert werden. Im Gegensatz dazu führt die Bestrahlung mit Au-Ionen zu einer extremen, einige Mikrometer großen Volumenausdehnung. Wie bei Bestrahlung mit I-Ionen zeigen sich drei charakteristische Bereiche, die jedoch nicht durch einen abrupten Übergang gekennzeichnet sind. Vielmehr zeigt sich bei der Bestrahlung mit Au-Ionen ein kontinuierlicher Übergang zwischen den drei Bereichen (siehe Abb. 4.21). Mit fortlaufender Bestrahlung ändert sich die Probenoberfläche ähnlich der Bestrahlung mit I-Ionen (vgl. Tab. 4.1) von dunkel (Bereich I), über schwarz (Bereich II) zu silberglänzend (Bereich III) [196].

B) Elektronenmikroskopische Charakterisierung

Die EM-Untersuchungen zeigen für die bei kleinen Fluenzen (Bereich I) mit Ag- und Au-Ionen bestrahlten Ge-Proben die Bildung einer stabilen nanoporösen Struktur an der Probenoberfläche, die dimensionell und strukturell vergleichbar mit der als schlauchförmig klassifizierten Oberflächenstruktur der 3 MeV I-Ionenbestrahlung ist [196]. Mit fortlaufender Bestrahlung vergrößert sich die Ausdehnung der porösen Schicht, z.B. $d_p \approx 325 \text{ nm}$ für Ag-Bestrahlung mit $N_I = 4.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. Eine Formierung von vergrabenen Hohlräumen in der Tiefe der projizierten Ionenreichweite R_p wird aber weder bei der Bestrahlung mit Ag- noch mit Au-Ionen beobachtet. Dies wird durch die in Abbildung 4.22a gezeigte cs-SEM-Aufnahme einer mit Au-Ionen und

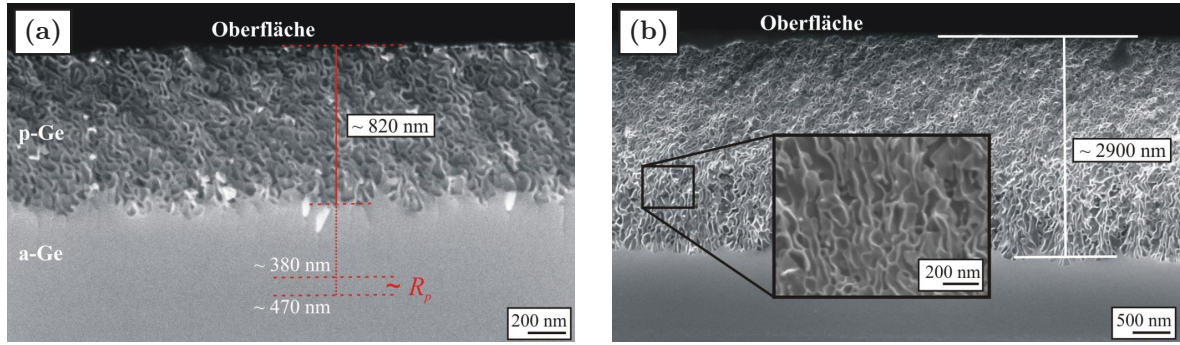


Abb. 4.22: Die cs-SEM-Aufnahmen einer mit 4.5 MeV Au^{2+} -Ionen bei RT und $\Theta = 7^\circ$ bestrahlten Ge-Probe verdeutlichen die ionenstrahlinduzierte Bildung (a, $N_I = 2.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) und die mit steigender Fluenz zunehmende Ausdehnung (b, $N_I = 5.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) einer porösen Oberflächenschicht, wobei keine Formierung von vergrabenen Hohlräumen in der Tiefe der projizierten Ionenreichweite R_p stattfindet [196].

$N_I = 2.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten Ge-Probe verdeutlicht (Bereich II, vgl. Abb. 4.21). Die Schicht in der Tiefe um R_p ist im Gegensatz zur Bestrahlung mit I-Ionen (vgl. Abb. 4.7b) amorph und hohlraumfrei. Die Bestrahlung mit Ag- und Au-Ionen resultiert für alle untersuchten Fluenzen ausschließlich in der Formierung einer porösen Oberflächenschicht, die sich im Fall der Au-Bestrahlung mit zunehmender Fluenz kontinuierlich in das amorphe Material ausdehnt. Diese bei Au-Bestrahlung induzierte poröse Schicht (vgl. Abb. 4.22b) weist eine ähnliche Struktur, Wandstärke und Hohlraumdimension wie die bei Bestrahlung mit I-Ionen auf (vgl. Abb. 4.9). Die Werte der relativen Dichteänderung $\alpha = 0.44$ für Ag- und $\alpha = 0.38$ für Au-Bestrahlung stimmen gut mit den Werten der Bestrahlung mit I-Ionen (vgl. Abb. 4.11) überein und weisen damit ebenfalls auf eine ähnliche poröse Struktur hin. Analog zur Bestrahlung mit I-Ionen kann die optische Veränderung der Probenoberfläche bei hohen Fluenzen auf die bei $N_I = 5.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ beginnende Bildung einer einige Mikrometer ausgedehnten Makrostruktur zurückgeführt werden [196].

2) LEI-Bestrahlungen mit Energien im Bereich einiger keV

Bestrahlungen mit Energien von einigen MeV resultieren in der Bildung von (10...100) nm großen blasenartigen Hohlräumen, die vollständig von (5...10) nm dicken Ge-Wänden umschlossen sind (vgl. Kap. 4.1.2.1, Abschnitt B). Während sich die Wandstärken mit steigender Fluenz nicht substantiell verringern, vergrößern sich die Hohlraumdurchmesser kontinuierlich, was selbst bei den größten untersuchten Fluenzen in einer sich fortwährend in vertikale Richtung ausdehnenden Volumenexpansion resultiert. Eine Sättigung der ionenstrahlinduzierten Strukturmodifikation und somit eine finale poröse Struktur konnte für Bestrahlungen mit Energien im Bereich $E = (2 \dots 9) \text{ MeV}$ nicht nachgewiesen werden. Im Folgenden soll daher die Entwicklung

der porösen Struktur für hohe Fluenzen anhand der Energiedeposition im oberflächennahen Bereich infolge der Bestrahlung mit $E = 380$ keV untersucht werden [203].

A) Vertikale Volumenausdehnung

In Abbildung 4.23a ist die für Fluenzen von $N_I > 1.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ beobachtete vertikale Volumenexpansion infolge der Bestrahlung von c-Ge mit 380 keV I- und Au-Ionen dargestellt. Unabhängig von der Ionenart zeigt sich eine extreme Volumenausdehnung [203]. Substantielle Differenzen im fluenzabhängigen Verlauf und in der maximal erzielten Volumenausdehnung weisen dabei auf wesentliche Unterschiede in der ionenstrahlinduzierten porösen Struktur hin. Die Au-Bestrahlung führt, bedingt durch einen steileren linearen Anstieg infolge $\varepsilon_n^{Au} > \varepsilon_n^I$ (vgl. Tab. A.1), bereits bei einer Fluenz von $N_I = 2.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ zu einer Sättigung der Volumenausdehnung mit einem Wert von $\Delta z \approx 560$ nm, während die Bestrahlung mit I-Ionen erst im Fluenzbereich $N_I \approx (4.5 \dots 5.25) \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ eine kurzzeitige Sättigung mit $\Delta z \approx 770$ nm bewirkt. Das Verhältnis $\Delta z/R_p$ beträgt im Fluenzbereich der Sättigung ungefähr $8.0 \dots 8.3$ (projizierte Ionenreichweite R_p siehe Tab. A.1) und deutet auf die Bildung einer strukturell identischen porösen Schicht hin (vgl. auch Kap. 4.1.2.3, Abschnitt B). Für die Au-Bestrahlung mit Fluenzen $N_I > 2.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ sinkt Δz infolge von Sputtererosionsprozessen leicht. Dies zeigt, dass ein stationärer Zustand erreicht wurde, bei dem bis zu der untersuchten Fluenz von $N_I = 1.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ keine weitere Strukturmodifikation stattfindet. Für die Bestrahlung mit I-Ionen hingegen steigt ab einer Fluenz von $N_I = 5.25 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ die Volumenausdehnung extrem an, erreicht einen

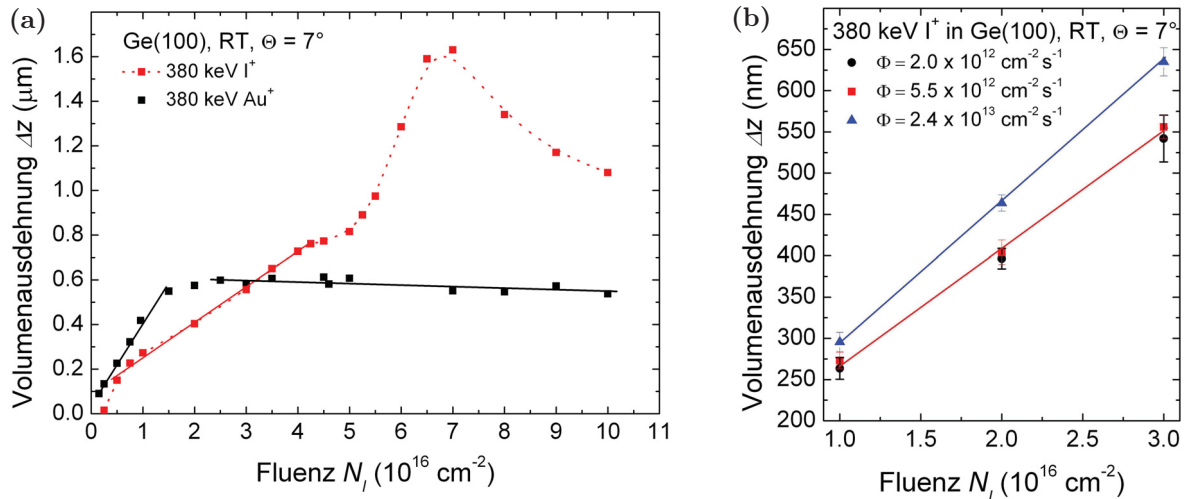


Abb. 4.23: Aus Oberflächenprofilometrie ermittelte mittlere Volumenausdehnung Δz als Funktion der Fluenz N_I für die bei RT mit 380 keV I^+ - und Au^+ -Ionen bestrahlten Ge-Proben (a). Die durchgezogenen Linien veranschaulichen den linearen Zusammenhang, während die rote, gepunktete Linie den generellen Verlauf hervorhebt. Der Einfluss des Ionenflusses Φ auf die Volumenausdehnung wird in (b) für die Bestrahlung mit 380 keV I^+ -Ionen gezeigt [203].

maximalen Wert von $\Delta z(N_I \approx 7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}) = 1.63 \text{ } \mu\text{m}$ und sinkt für Fluenzen von $N_I > 7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ kontinuierlich ab (siehe Abb. 4.23a) [203].

Abhängig vom Ionenfluss Φ ist in Abbildung 4.23b die infolge der Bestrahlung mit 380 keV I-Ionen induzierte Volumenausdehnung als Funktion der Fluenz dargestellt. Für $\Phi = 2.0 \times 10^{12}$ und $5.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ist kein signifikanter Unterschied in den induzierten Volumenausdehnungen bei gleichen Fluenzen zu beobachten, während für $\Phi = 2.4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ die Volumenausdehnung deutlich ansteigt. Die Vergrößerung der Volumenausdehnung kann auf die Temperaturabhängigkeit der Hohlraumformierung zurückgeführt werden (vgl. Kap. 4.1.2.2), da die ionenstrahlinduzierte Erwärmung der Proben mit steigendem Ionenfluss zunimmt [204] und in einer erhöhten thermischen Defektmobilität, die die Bildung und das Wachstum von Hohlräumen beschleunigt [51, 53], resultiert [203]. Für alle in dieser Arbeit durchgeführten LEI-Bestrahlungen beträgt der Ionenfluss $\Phi = (1 \dots 6) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, so dass ein substantieller Einfluss thermisch induzierter Effekte auf die gemessenen Volumenausdehnungen ausgeschlossen wird. Zudem wirken sich die in den langen Strahlzeiten auftretenden Schwankungen des Ionenflusses von bis zu $\pm 15\%$ nicht auf die Volumenausdehnung aus.

B) Elektronenmikroskopische Charakterisierung

In Abbildung 4.24 und 4.25 sind ausgewählte cs-SEM-Aufnahmen der mit 380 keV I-Ionen bestrahlten Ge-Proben dargestellt. Für Fluenzen $N_I < 4.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ zeigt sich die Formierung einer $d_p = 485 \text{ nm}$ (Abb. 4.24a) und $d_p \approx 1.0 \text{ } \mu\text{m}$ (Abb. 4.24b) dicken porösen Schicht an der Probenoberfläche, die bezogen auf die entstandenen Hohlraumdurchmesser und Wandstärken strukturell und dimensionell vergleichbar mit den Bestrahlungen bei Energien von einigen MeV ist (vgl. Abb. 4.6 und 4.8c) [203]. Anhand der in Abbildung 4.25a dargestellten cs-SEM-Aufnahme einer mit $N_I = 6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten Ge-Probe wird deutlich, dass der erneute Anstieg in Δz (vgl.

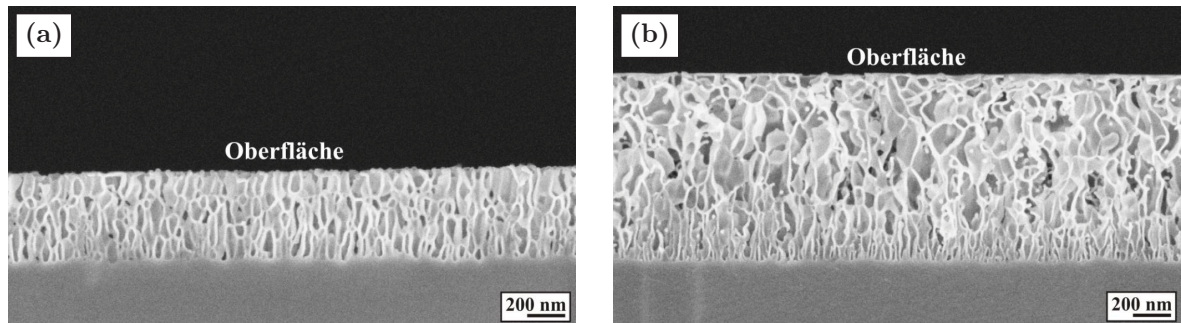


Abb. 4.24: Die cs-SEM-Aufnahmen einer mit 380 keV I^+ -Ionen bei RT und $\Theta = 7^\circ$ bestrahlten Ge-Probe verdeutlichen die ionenstrahlinduzierte Bildung (a, $N_I = 1.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) und die mit steigender Fluenz zunehmende Ausdehnung (b, $N_I = 4.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) einer scharf zum unterliegenden Substrat abgegrenzten porösen Oberflächenschicht [203].

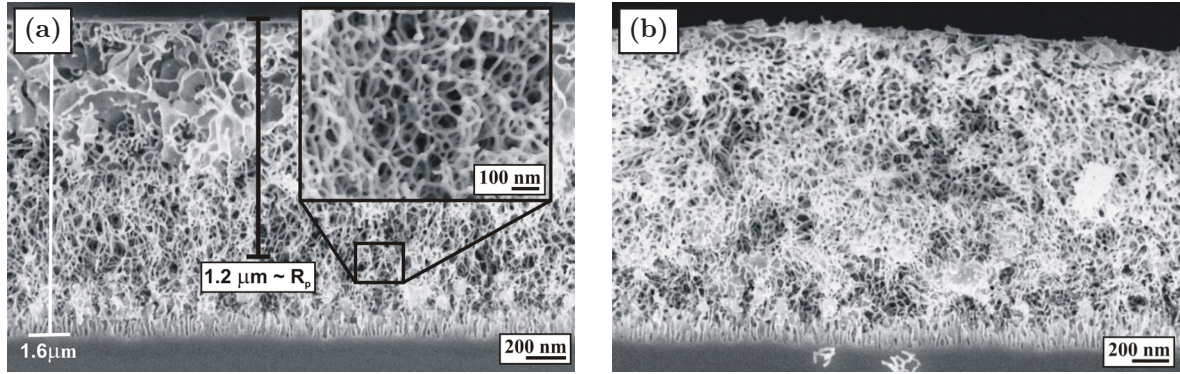


Abb. 4.25: Die cs-SEM-Aufnahmen einer mit 380 keV I^+ -Ionen bei RT und $\Theta = 7^\circ$ bestrahlten Ge-Probe verdeutlichen die Formierung einer vergrabenen netzwerkartigen porösen Struktur bestehend aus untereinander verbundenen Nanodrähten (a, $N_I = 6.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) sowie deren Ausdehnung über die gesamte oberflächennahe Schicht mit zunehmender Fluenz N_I (b, $N_I = 9.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) [203].

Abb. 4.23a) auf die erstmalig in Ge nachgewiesene ionenstrahlinduzierte Bildung einer vergrabenen netzwerkartigen porösen Struktur bestehend aus (10...15) nm dünnen, untereinander verbundenen Nanodrähten zurückzuführen ist. Die Struktur im oberflächennahen Bereich ist weiterhin charakterisiert durch große, nahezu vollständig von dünnen Ge-Wänden umschlossene Hohlräume, was darauf schließen lässt, dass die ionenstrahlinduzierte Formierung von Nanodrähten in einer Tiefe um das Maximum der nuklearen Energiedeposition ε_n^{max} bzw. der projizierten Ionenreichweite R_p stattfindet (siehe Abb. 4.25a) [203]. Eine bis zur Probenoberfläche ausgedehnte, netzwerkartige Struktur wird im Fluenzbereich der maximalen Volumenausdehnung beobachtet ($N_I = 7.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$). Die relative Volumenausdehnung beträgt dabei lediglich $\alpha \approx 0.1$. Die kontinuierliche Abnahme der Volumenausdehnung Δz für Fluenzen $N_I > 7.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ kann nicht wie bei porösem GaSb (siehe Kap. 2.4 und [191]) durch eine infolge akkumulativer Bestrahlung bedingte Neuorientierung der netzwerkartigen Struktur erklärt werden, da sich die Orientierung der porösen Struktur in den in Abbildung 4.25a und 4.25b gezeigten cs-SEM-Aufnahmen nicht wesentlich unterscheidet. Vielmehr deuten die EM-Untersuchungen (siehe Abb. 4.25b) darauf hin, dass sich die Durchmesser der Nanodrähte in der Tiefe um ε_n^{max} stetig reduzieren, was schließlich zu einer strukturellen Instabilität der gesamten porösen Schicht führt. Für den gesamten untersuchten Fluenzbereich wird zudem eine scharf definierte Grenze zwischen poröser und amorpher Schicht nachgewiesen, aber keine Formierung von vergrabenen Hohlräumen (siehe Abb. 4.24 und 4.25) [203].

Die in Abbildung 4.26 dargestellten pv-SEM-Aufnahmen der bestrahlten Probenoberflächen weisen für Fluenzen im Bereich $N_I \approx (0.25 \dots 1.5) \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (vgl. Abb. 4.26a) auf die Bildung einer nanoporösen Oberfläche hin, deren Krater den (30...50) nm großen, offenen Enden der porösen Struktur in Abbildung 4.24a ent-

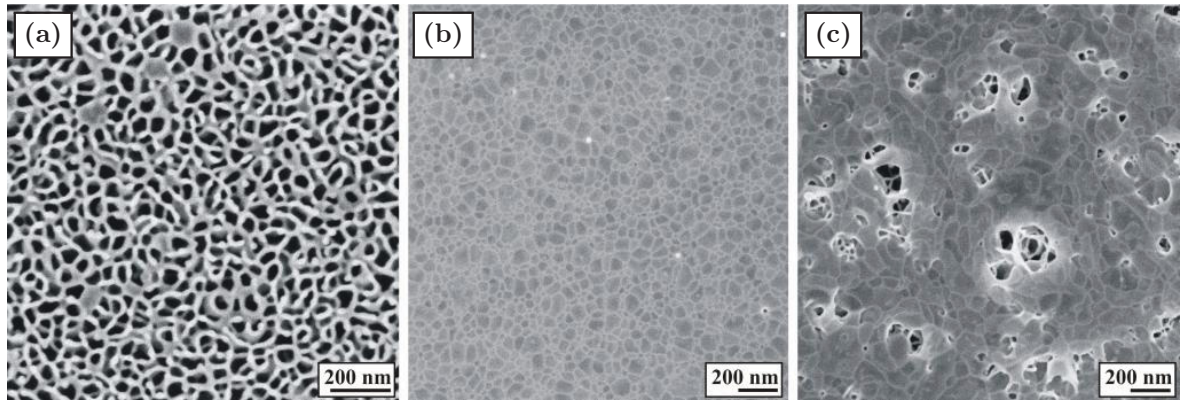


Abb. 4.26: Die pv-SEM-Aufnahmen einer mit 380 keV I^+ -Ionen bestrahlten Ge-Probe bei RT und $\Theta = 7^\circ$ zeigen für kleine Fluenzen (a, $N_I = 1.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) die Formierung einer offenen nanoporösen Struktur an der Probenoberfläche, während in (b, $N_I = 2.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) die poröse Probenoberfläche komplett durch eine dünne Ge-Schicht bedeckt ist. Für höhere Fluenzen (c, $N_I = 6.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) beginnt die Probenoberfläche lokal aufzureißen, wodurch die unterliegende, netzwerkartige Struktur erkennbar wird [203].

sprechen [203]. Die in diesem Fluenzbereich beobachtete stark reduzierte Reflektivität bzw. die schwarze Verfärbung der Ge-Proben ist eine unmittelbare Folge dieser Strukturmodifikation. Im Fluenzbereich $N_I \approx (1.5 \dots 5.0) \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ erscheinen die bestrahlten Probenoberflächen hellgrau schimmernd, was auf die Formierung einer nur wenige nanometerdicken, die Probenoberfläche vollständig bedeckenden Ge-Schicht zurückgeführt werden kann. Die unterliegende Struktur, d.h. die Hohlräume und die (10...15) nm dicken Ge-Wände, sind weiterhin deutlich sichtbar (siehe Abb. 4.26b). Für Fluenzen $N_I > 6.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ reißt die dünne Oberflächenschicht lokal auf und deckt die darunter befindliche netzwerkartige Struktur auf (siehe Abb. 4.26c). Mit fortwährender Bestrahlung vergrößern sich die offenen Bereiche lateral (siehe Abb. 4.27a), bis nahezu die gesamte Oberfläche durch die netzwerkartige poröse Struktur gekenn-

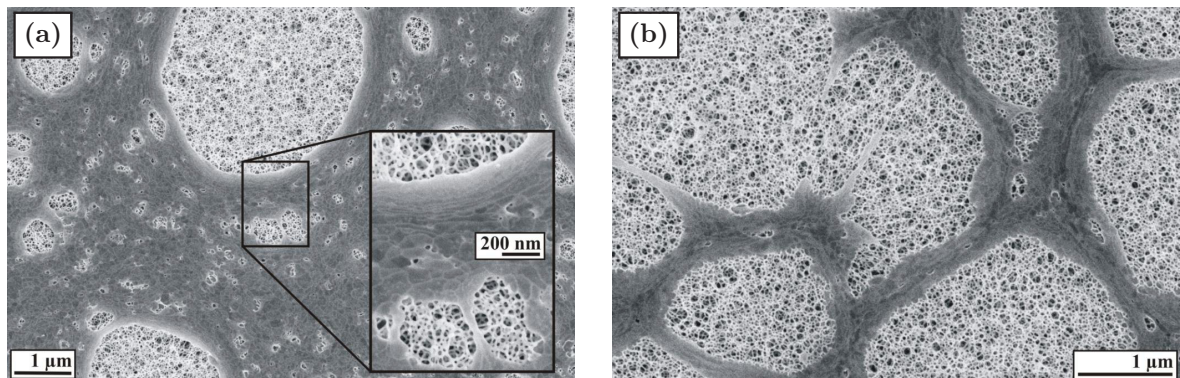


Abb. 4.27: Die pv-SEM-Aufnahmen einer mit 380 keV I^+ -Ionen und $N_I = 9.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (a) sowie $N_I = 1.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ (b) bestrahlten Ge-Probe bei RT und $\Theta = 7^\circ$ verdeutlichen die mit zunehmender Fluenz kontinuierliche Freilegung der unterliegenden netzwerkartigen porösen Struktur [203].

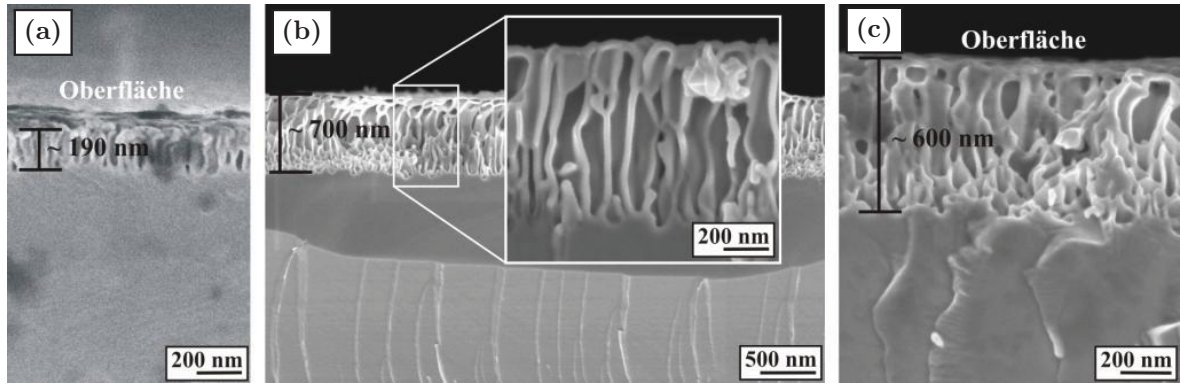


Abb. 4.28: Die cs-SEM-Aufnahmen der mit 380 keV Au^+ -Ionen bei RT und $\Theta = 7^\circ$ bestrahlten Ge-Proben zeigen die ionenstrahlinduzierte Formierung von Hohlräumen direkt an der Probenoberfläche (a, $N_I = 2.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$), deren Wachstum und die Bildung einer ausgedehnten porösen Schicht (b, $N_I = 3.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$), die sich mit fortlaufender Bestrahlung strukturell nicht wesentlich ändert (c, $N_I = 7.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) [203].

zeichnet ist (siehe Abb. 4.27b) [203]. Dies bewirkt erneut eine deutliche Reduzierung der Reflektivität der Probenoberfläche.

Aus den in Abbildung 4.28 dargestellten cs-SEM-Aufnahmen der mit 380 keV Au-Ionen bestrahlten Ge-Proben geht hervor, dass die ionenstrahlinduzierte Hohlraum-bildung unmittelbar an der Probenoberfläche einsetzt (Abb. 4.28a) und sich mit zunehmender Fluenz eine ausgedehnte poröse Schicht, bestehend aus schlauchförmigen, senkrecht zur Oberfläche orientierten Hohlräumen formiert (Abb. 4.28b). Strukturell unterscheiden sich diese porösen Schichten nicht von den ionenstrahlinduzierten Strukturen, die durch die Bestrahlung mit 380 keV I-Ionen (vgl. Abb. 4.24) oder die Bestrahlung mit kinetischen Energien im Bereich von $E = (3 \dots 9) \text{ MeV}$ (vgl. Abb. 4.6 und 4.7) entstanden sind. Die für den Sättigungsbereich ermittelte relative Dichteänderung $\alpha^{\text{Au}} \approx 0.22$ ist in sehr guter Übereinstimmung mit dem für die Bestrahlung mit 380 keV I-Ionen abgeschätzten Wert von $\alpha^{\text{I}} \approx 0.20$. Die Struktur, charakterisiert durch vollständig von dünnen Ge-Wänden umschlossene Hohlräume, ist im gesamten Fluenzbereich der Sättigung nahezu identisch (vgl. Abb. 4.28b mit 4.28c), scheint aber mit wachsender Fluenz zunehmend brüchig und instabil. Eine Umwandlung in eine netzwerkartige poröse Schicht bzw. die Bildung von Nanodrähten wurde nicht nachgewiesen [203].

Die unabhängig von der Ionenenergie, der Energiedeponierung und der Eindringtiefe der Ionen beobachteten substantiellen Unterschiede in den induzierten porösen Strukturen, d.h. die Bildung von vergrabenen Hohlräumen ($E = (3 \dots 9) \text{ MeV}$) oder netzwerkartigen Strukturen ($E = 380 \text{ keV}$) in der Tiefe um die Ionenreichweite R_p , deuten auf eine Abhängigkeit der Hohlraumformierung von den implantierten Ionen, d.h. deren physikalischen und chemischen Eigenschaften, hin (siehe Kap. 5.1.1.3).

4.2 Hochenergetische Ionenbestrahlung

4.2.1 Vorbetrachtungen

Die Untersuchung der durch Ge-Mehrfachbestrahlung hergestellten a-Ge-Oberflächenschichten (siehe Kap. 3.1) erfolgte mittels RBS/C, TEM, Elektronenbeugung und RS. Mit diesen komplementären Analyseverfahren wurde übereinstimmend eine homogene und hohlraumfreie amorphe Ge-Schicht für die gesamte bestrahlte Probenoberfläche nachgewiesen, die sich bis zum unterliegenden c-Ge-Substrat bei einer Tiefe von $z = d_{am} = (3.10 \pm 0.05) \mu\text{m}$ ausdehnt. Da die SHI-Bestrahlung von c-Ge zu keiner Defektformierung führt (vgl. Kap. 2.3.2.1), verschiebt sich der ungefähr 80 nm dicke, inhomogen geschädigte Übergangsbereich amorph-kristallin infolge der SHI-Bestrahlung nicht in größere Tiefe, d.h. die Dicke der amorphen Schicht d_{am} bleibt konstant.

In Abbildung 4.29 ist eine repräsentative Lichtmikroskopaufnahme einer mit Au-Quadraten strukturierten Ge-Probenoberfläche dargestellt. Die untere Hälfte der abgebildeten Probe wurde unter einem Einfallswinkel von $\Theta = 45^\circ$ mit 89 MeV Au-Ionen und einer Fluenz von $N_I = 1.45 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlt, während der obere Teil der Probe entsprechend der in Abbildung 3.1c dargestellten Bestrahlungsgeometrie durch eine Blende maskiert war. Im Vergleich zur unbestrahlten Referenz werden im bestrahlten Bereich beide unabhängig voneinander auftretenden ionenstrahlinduzierten Effekte, anisotrope plastische Deformation und Hohlraumbildung, deutlich (siehe Abb. 4.29) [205]. Die sich über den Grenzbereich bestrahlt-unbestrahlt erstreckende Au-Markierung verdeutlicht die homogene laterale Verschiebung der unter schrägem Winkel bestrahlten a-Ge-Schicht. Die positive Oberflächenverschiebung $\Delta x > 0$ zeigt, dass die a-Ge-Schicht unter schräger SHI-Bestrahlung auf dem c-Ge-Substrat in Richtung der Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche plastisch fließt (vgl. Pfeile in Abb. 4.29). Darüber hinaus wird eine vertikale Volumenausdehnung des bestrahlten Be-

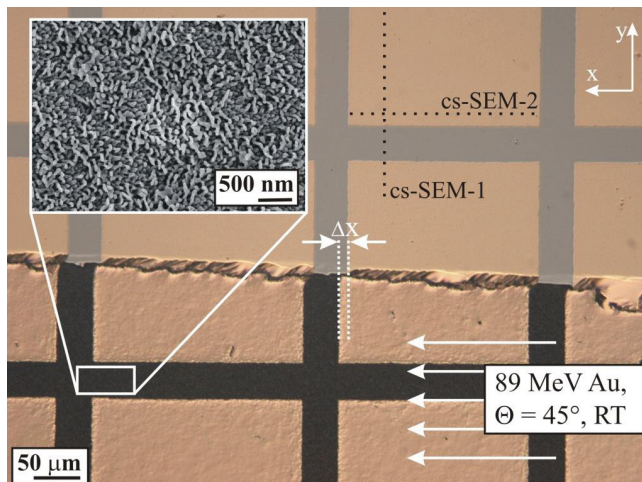


Abb. 4.29: Die Lichtmikroskopaufnahme einer bei RT mit 89 MeV Au^{9+} -Ionen unter 45° und $N_I = 1.45 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten a-Ge-Probe verdeutlicht im Vergleich zum unbestrahlten Referenzbereich die ionenstrahlinduzierten Strukturmodifikationen (plastisches Fließen und Volumenexpansion). Die pv-SEM-Aufnahme zeigt einen vergrößerten Ausschnitt der bestrahlten Probenoberfläche und die Entstehung einer nanoporösen Oberflächenstruktur [205].

reichs durch den Vergleich mit dem unbestrahlten Bereich der Probe ersichtlich. Zudem ist eine stark erhöhte Oberflächenrauigkeit aufgrund der Bildung poröser Strukturen direkt an der Probenoberfläche zu beobachten (vgl. pv-SEM-Aufnahme in Abb. 4.29), die in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen der LEI-Experimente zu einer stark reduzierten Reflektivität der bestrahlten Probenoberfläche führt [205].

Die ionenstrahlinduzierten Strukturmodifikationen (plastische Deformation und Hohlraumbildung) wurden experimentell ebenfalls für SHI-Bestrahlungen mit Xe-, Pb- und U-Ionen nachgewiesen, wobei sich die Ergebnisse nicht signifikant von der SHI-Bestrahlung mit Au-Ionen unterscheiden. Im Rahmen dieser Arbeit werden daher nur die experimentellen Ergebnisse für die Au-Bestrahlungen diskutiert.

4.2.2 Ionenstrahlinduzierte Hohlraumbildung

4.2.2.1 SHI-Bestrahlung bei Raumtemperatur

A) Vertikale Volumenausdehnung

An allen mit Au-Ionen bei RT bestrahlten a-Ge-Proben wurde, unabhängig von der Ionenenergie und dem Einfallswinkel und somit unabhängig von der elektronischen Energiedeposition ϵ_e (vgl. Tab. A.1), bereits bei einer Fluenz von $N_I = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ eine ionenstrahlinduzierte vertikale Volumenexpansion Δz nachgewiesen. In Abbildung 4.30 sind die aus Oberflächenprofilometrie-Messungen ermittelten mittleren Werte für Δz als Funktion der Fluenz für die mit verschiedenen Parametern bestrahlten a- und c-Ge-Proben aufgetragen.

Aus den in Abbildung 4.30 dargestellten Ergebnissen der mit 185 MeV Au-Ionen unter $\Theta = 45^\circ$ bestrahlten c-Ge-Proben geht hervor, dass die SHI-Bestrahlung über einen großen Fluenzbereich zu einer geringen, aber kontinuierlich ansteigenden Volumenausdehnung führt [205]. Bis zu einer Fluenz von $N_I = 7.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ist Δz

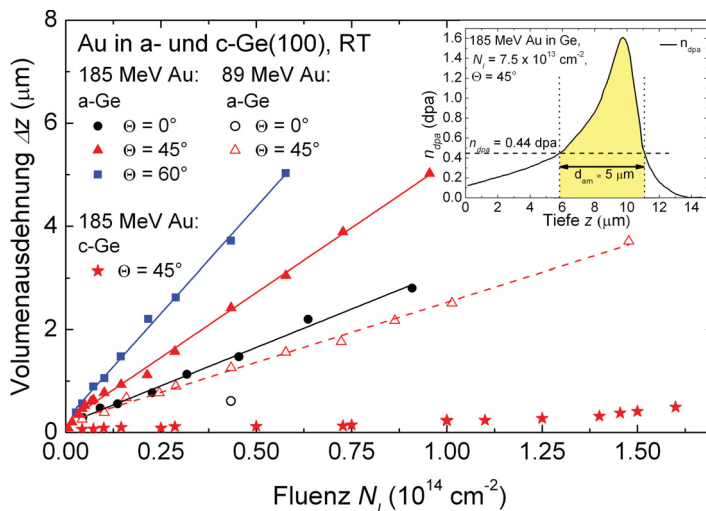


Abb. 4.30: Aus Oberflächenprofilometrie-Messungen ermittelte mittlere vertikale Volumenausdehnung Δz als Funktion der Fluenz N_I für die bei RT mit 89 und 185 MeV Au-Ionen unter $\Theta = 0^\circ, 45^\circ$ und 60° bestrahlten a-Ge-Proben. Zum Vergleich wurde die Volumenausdehnung einer mit 185 MeV Au¹³⁺-Ionen ($\Theta = 45^\circ$) bestrahlten c-Ge-Probe eingetragen. Die Daten wurden linear interpoliert [205].

kleiner als 150 nm. Diese geringe Volumenausdehnung kann der ionenstrahlinduzierten Amorphisierung des kristallinen Materials durch den in einer Tiefe von $z \approx 10 \mu\text{m}$ dominierenden nuklearen Energieeintrag (vgl. Abb. 3.3) und der damit verbundenen strukturellen Dichteänderung $\Delta\rho$ zugeschrieben werden. Mit fortlaufender Bestrahlung werden somit in der Tiefe $z \approx 10 \mu\text{m}$ zunehmend Ge-Atome aufgrund elastischer Stöße von ihren Gitterplätzen deplaziert. Eine tiefenabhängige Abschätzung der Deplazierungen pro Gitteratom $n_{dpa}(z)$ infolge nuklearen Energieeintrags kann nach Gleichung 2.7 mittels dem aus SRIM2008 bestimmten tiefenabhängigen Verlauf der versetzten Atome $N_{displ}(z)$ gewonnen werden. Basierend auf den experimentellen Ergebnissen der LEI-Bestrahlungen (siehe Kap. 4.1.1.1, $n_{dpa}(N_I^{am}) = 0.44 \text{ dpa}$) ist für die Bestrahlung mit 185 MeV Au-Ionen unter $\Theta = 45^\circ$ und $N_I = 7.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ eine vergrabene amorphe Schicht im Tiefenbereich von $6 \mu\text{m} \leq z \leq 11 \mu\text{m}$ zu erwarten (siehe Einschub in Abb. 4.30). Die auf diese Weise abgeschätzte Ausdehnung der vergrabenen amorphen Schicht $d_{am} \approx 5 \mu\text{m}$ zeigt eine gute Übereinstimmung mit der aus der Aufwölbung über die Gleichung $d_{am} = \Delta z^{am} / \Delta\rho \approx 4.7 \mu\text{m}$ abgeschätzten amorphen Schichtdicke ($\Delta z^{am} = 150 \text{ nm}$, vgl. Abb. 4.30; experimentelle Bestimmung von $\Delta\rho$ siehe Kap. 4.1.1.2). Folglich ist für die Bestrahlung von c- und a-Ge-Proben bei Fluenzen $N_I > 2.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ die Bildung einer ausgedehnten homogenen amorphen Tiefenschicht zu erwarten, die sich stetig mit wachsender Fluenz in Richtung Oberfläche ausbreitet. Für Fluenzen $N_I > 7.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ wird ein Anstieg von Δz beobachtet (siehe Abb. 4.30), der nicht allein durch die Dichteänderung einer sich kontinuierlich ausdehnenden amorphen Tiefenschicht erklärt werden kann, sondern vielmehr auf eine zusätzliche strukturelle Modifikation hinweist. Die unverändert hohe Reflektivität der bestrahlten c-Ge-Proben deutet zudem darauf hin, dass der Anstieg von Δz auch nicht auf eine Strukturänderung an der Probenoberfläche, d.h. im Bereich des maximalen elektronischen Energieeintrags, zurückzuführen ist [205].

Im Gegensatz zu c-Ge ist bei den SHI-bestrahlten a-Ge-Proben eine extreme Volumenausdehnung zu beobachten. Für die in Abbildung 4.30 dargestellten Volumenausdehnungen der a-Ge-Proben wurden die geringen, aber nicht vernachlässigbaren Volumenexpansionen des c-Ge-Substrats von den gemessenen Volumenausdehnungen subtrahiert, so dass die für a-Ge ermittelten Werte von Δz ausschließlich die ionenstrahlinduzierte Strukturmodifikation in der amorphen Oberflächenschicht charakterisieren. Unabhängig von den Bestrahlungsparametern kann für a-Ge ein linearer Anstieg in der Volumenausdehnung Δz mit wachsender Fluenz N_I beobachtet werden [205],

$$\Delta z = \xi N_I, \quad (4.3)$$

wobei sich die Gradienten ξ für die verschiedenen Bestrahlungsbedingungen deutlich unterscheiden (siehe Tab. 4.3). Die Ionenbestrahlung führt in den untersuchten Fluenz-

Tab. 4.3: Die aus den Experimenten zur vertikalen Volumenexpansion (siehe Abb. 4.30) ermittelten Werte der Gradienten ξ und die für eine Fluenz von $N_I = 4.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ bestimmten Werte von Δz für die verschiedenen Bestrahlungsbedingungen (Energie E , Einfallswinkel Θ und die über die amorphe Schicht d_{am} gemittelte elektronische Energiedeposition $\bar{\varepsilon}_e$).

E (MeV)	Θ (°)	$\bar{\varepsilon}_e$ (keV nm ⁻¹)	ξ (10 ⁻¹⁴ $\mu\text{m cm}^2$)	Δz (μm)
89	0	14.0	-	0.61 ± 0.02
89	45	18.1	2.33 ± 0.02	1.26 ± 0.02
185	0	21.0	2.98 ± 0.04	1.47 ± 0.03
185	45	28.3	5.02 ± 0.04	2.45 ± 0.04
185	60	38.6	8.26 ± 0.07	4.03 ± 0.05

bereichen zu einer maximalen Volumenausdehnung von $\Delta z = 5 \mu\text{m}$, was einer relativen Dichteänderung von $\alpha \approx 0.39$ entspricht. Eine Sättigung der Volumenexpansion konnte nicht nachgewiesen werden. Die anhand Abbildung 4.30 bestimmten Gradienten ξ sowie die für eine Fluenz von $N_I = 4.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ermittelten Volumenausdehnungen Δz sind in Tabelle 4.3 für die verschiedenen Bestrahlungsbedingungen aufgelistet. Es wird deutlich, dass der Gradient ξ sowohl mit Erhöhung der Ionenenergie E bei konstantem Einfallswinkel Θ als auch mit Vergrößerung des Einfallswinkels bei gleicher Energie ansteigt. Offensichtlich korreliert der Gradient ξ mit der über die gesamte a-Ge-Schicht in elektronische Prozesse deponierten Energie ε_e (vgl. Tab. 4.3) [205].

B) Elektronenmikroskopische Charakterisierung

Die Charakterisierung der ionenstrahlinduzierten Strukturmodifikationen mittels cs-SEM erfolgt am Beispiel der Bestrahlung mit 185 MeV Au-Ionen unter $\Theta = 45^\circ$ an ausgewählten Ge-Proben, deren Querschnitte senkrecht zur Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche orientiert sind (cs-SEM-1, vgl. Abb. 4.29) [205]. Die in Abbildung 4.31 gezeigte cs-SEM-Aufnahme ($N_I = 7.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) verdeutlicht den Beginn

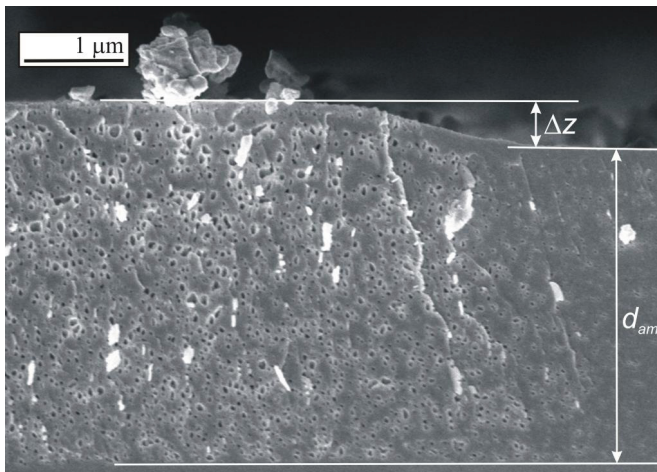


Abb. 4.31: In der cs-SEM-Aufnahme (cs-SEM-1, vgl. Abb. 4.29) einer bei Raumtemperatur und $\Theta = 45^\circ$ mit 185 MeV Au¹³⁺-Ionen und $N_I = 7.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten a-Ge-Probe ist die Bildung von einzelnen vergrabenen sphärischen Hohlräumen innerhalb der $d_{am} = 3.1 \mu\text{m}$ dicken a-Ge-Schicht und die daraus resultierende vertikale Volumenausdehnung Δz dargestellt.

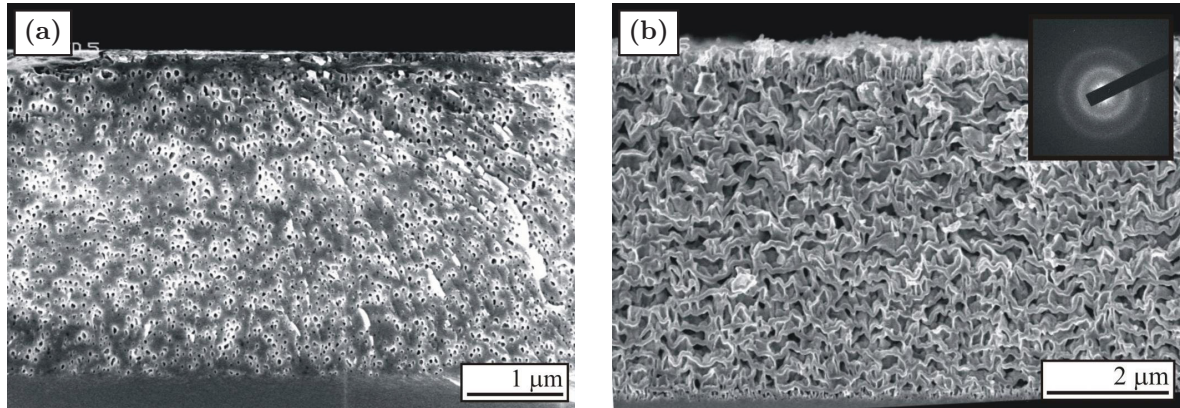


Abb. 4.32: Cs-SEM-Aufnahmen (cs-SEM-1, vgl. Abb. 4.29) einer bei RT und 45° mit 185 MeV Au^{13+} -Ionen und $N_I = 1.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (a) sowie $1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (b) bestrahlten a-Ge-Probe. Die innerhalb der a-Ge-Schicht entstandenen Hohlräume (a) wachsen und akkumulieren mit steigender Fluenz und resultieren in einer kontinuierlichen, sich von der Oberfläche bis zum unterliegenden c-Ge-Substrat erstreckenden, schwammartigen porösen Schicht (b).

der Formierung von zufällig über die gesamte Dicke der amorphen Schicht verteilten, nahezu sphärischen Hohlräumen mit einem Durchmesser von (20...80) nm. Die für den bestrahlten Bereich resultierende vertikale Volumenausdehnung Δz ist gegenüber dem unbestrahlten Referenzbereich der Probe, in dem sich keine Hohlräume gebildet haben, ebenfalls zu erkennen (vgl. Abb. 4.31). Mit zunehmender Fluenz vergrößert sich der Durchmesser der Hohlräume kontinuierlich (Abb. 4.32a, $N_I = 1.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$), bis die anfänglich homogene a-Ge-Schicht vollständig in eine schwammartige poröse Struktur ohne bevorzugte Orientierung mit nunmehr unformigen, einige 100 nm ausgedehnten Hohlräumen umgewandelt wurde (Abb. 4.32b, $N_I = 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$). Die an dieser porösen Struktur durch Elektronenbeugung ermittelten charakteristischen diffusen Beugungsringe weisen auf die amorphe Struktur der Ge-Wände hin (siehe Elektronenbeugungsbild in Abb. 4.32b). Der scharf definierte Übergang zwischen der porösen oberflächennahen Schicht und dem unterliegenden Substrat, das auch nach der SHI-Bestrahlung kristallin und frei von Hohlräumen ist, entspricht dem ursprünglichen Übergang amorph-kristallin in der Tiefe $z = 3.1 \mu\text{m}$. Die experimentellen Ergebnisse der Hochenergiebestrahlung ($\varepsilon_e \gg \varepsilon_n$) von a-Ge zeigen, dass die Bildung von Hohlräumen, die mit fortlaufender Bestrahlung akkumulieren und zur Bildung einer porösen oberflächennahen Schicht führen, ausschließlich in der $d_{am} = 3.1 \mu\text{m}$ dicken, voramorphisierten oberflächennahen Schicht erfolgt [181, 205].

Aus den in Abbildung 4.33 dargestellten cs-SEM-Aufnahmen von hochfluenzbestrahlten c- (a) und a-Ge-Proben (b) geht hervor, dass die Hochenergiebestrahlung von c-Ge im oberflächennahen Bereich ($z < 4 \mu\text{m}$) weder zu der bei a-Ge-Proben beobachteten Formierung von Hohlräumen führt (vgl. Abb. 4.33a mit Abb. 4.32 und 4.33b) noch, wie RBS/C-Untersuchungen belegen, in einer Defektformierung oder Amorphi-

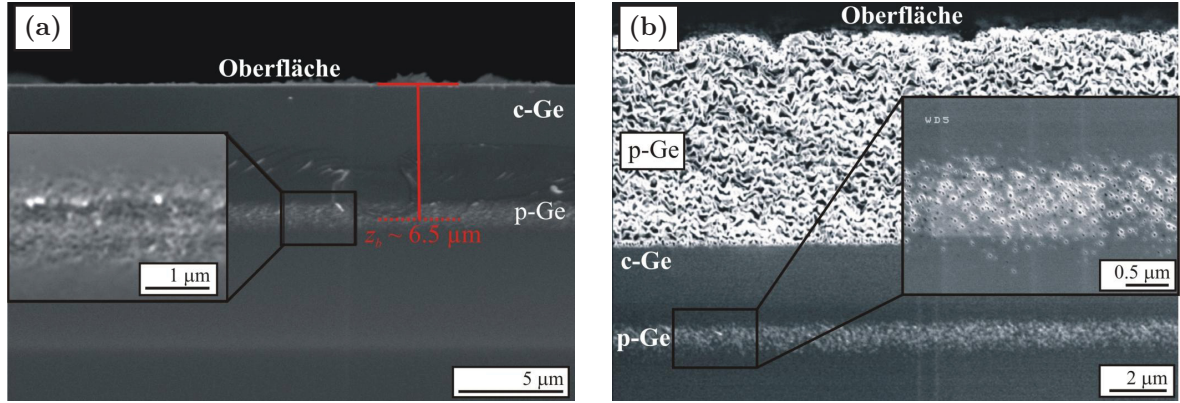


Abb. 4.33: Cs-SEM-Aufnahmen einer bei RT und $\Theta = 45^\circ$ mit 185 MeV Au^{13+} -Ionen bestrahlten c-Ge- (a, $N_I = 1.5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$) und a-Ge-Probe (b, $N_I = 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$). Sowohl für c-Ge als auch für a-Ge wird die Bildung einer vergrabenen porösen Schicht in dem anfänglich kristallinen Material bei einer Tiefe von $z_b \approx 6.5 \mu\text{m}$ nachgewiesen [205].

sierung resultiert [205]. Unter denselben Bestrahlungsbedingungen bewirkt die SHI-Bestrahlung bei hohen Fluenzen sowohl in c-Ge als auch in a-Ge die Bildung einer vergrabenen porösen Schicht bestehend aus einzelnen isolierten Hohlräumen. In beiden Fällen (c- und a-Ge) entstehen die ionenstrahlinduzierten Hohlräume in einer auf die ursprüngliche Probenoberfläche bezogenen Tiefe von $z_b \approx 6.5 \mu\text{m}$ (siehe Abb. 4.33). Der Vergleich mit dem in Abbildung 3.3 aufgetragenen Tiefenprofil von ε_n zeigt, dass z_b ungefähr 2/3 der Tiefe des maximalen nuklearen Energieeintrags $\varepsilon_n^{\text{max}}(z = 10 \mu\text{m})$ entspricht. Folglich resultiert die Formierung einer vergrabenen porösen Schicht nicht durch die Hohlraumbildung aufgrund nuklearer Energiedeposition, da keine Hohlräume in der Tiefe um $\varepsilon_n^{\text{max}}$ beobachtet werden. Die in c-Ge für Fluenzen $N_I > 7.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ansteigende Volumenexpansion (vgl. Abb. 4.30) kann nun eindeutig auf die Formierung und das Wachstum vergrabener Hohlräume (vgl. Abb. 4.33a) zurückgeführt werden [205].

4.2.2.2 SHI-Bestrahlung bei Tieftemperatur

A) Vertikale Volumenausdehnung

Die Ergebnisse der SHI-Bestrahlungen von c- und a-Ge-Proben bei Raum- und Tieftemperatur ($T_{TT} = 50 \text{ K}$) unter identischen experimentellen Bedingungen (gepulster Ionenstrahl: 940 MeV Au-Ionen, $\Theta = 0^\circ$, Puls $\approx 45 \text{ Hz}$, Pulslänge: 2 ms) sind in Abbildung 4.34 als Funktion der Fluenz dargestellt. Während die Bestrahlung der c-Ge-Proben im gesamten untersuchten Fluenzbereich nur eine geringe, d.h. vernachlässigbare Volumenausdehnung bewirkt (nicht gezeigt), zeigen die fluenzabhängigen Untersuchungen von a-Ge, dass sowohl bei RT als auch bei TT die Bestrahlung zu einer nahezu linear mit der Fluenz ansteigenden Volumenausdehnung Δz führt [206]. Für gleiche Fluenzen ist Δz für die bei RT bestrahlten a-Ge-Proben höher als bei Bestrah-

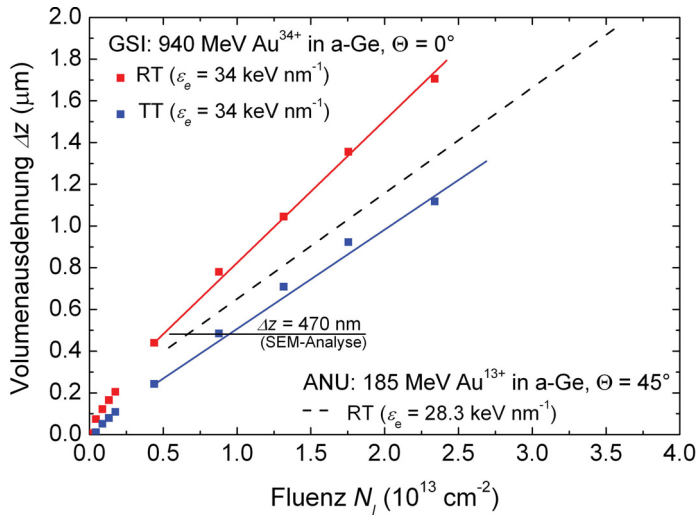


Abb. 4.34: Fluenzabhängige Darstellung der aus Oberflächenprofilometrie-Messungen ermittelten mittleren vertikalen Volumenausdehnung Δz für die bei RT und TT mit 940 MeV Au^{34+} -Ionen senkrecht bestrahlten a-Ge-Proben. Zum Vergleich ist der lineare Verlauf der mit 185 MeV Au^{13+} -Ionen ($\Theta = 45^\circ$) bestrahlten a-Ge-Proben (vgl. Abb. 4.30) gezeigt. Die Daten wurden linear interpoliert [206].

lungstemperaturen von $T_{TT} = 50 \text{ K}$. Dabei weist das Verhältnis von $\Delta z^{TT}/\Delta z^{RT}$ über den gesamten untersuchten Fluenzbereich einen nahezu konstanten Wert von ≈ 0.6 auf. Der Vergleich von $\Delta z^{RT}(E = 940 \text{ MeV})$ mit den ebenfalls in Abbildung 4.34 aufgetragenen Ergebnissen der RT-Bestrahlung von a-Ge mit 185 MeV Au-Ionen unter $\Theta = 45^\circ$ (gestrichelte schwarze Linie) verdeutlicht erneut die Abhängigkeit der Volumenexpansion von der über die gesamte a-Ge-Schicht in elektronische Prozesse deponierten Energie $\bar{\epsilon}_e$. Die Volumenausdehnung nimmt mit steigendem Energieeintrag zu (vgl. Abb. 4.34). Unabhängig von der Bestrahlungstemperatur zeigen die a-Ge-Proben für gleiche Werte von Δz eine vergleichbar starke Reduzierung der Reflektivität ähnlich der Au-Bestrahlung mit 89 und 185 MeV, während die c-Ge-Proben auch nach der SHI-Bestrahlung durch eine unveränderte, silberglänzende Probenoberfläche gekennzeichnet sind [206].

B) Elektronenmikroskopische Charakterisierung

EM-Untersuchungen der bei RT und TT bestrahlten a-Ge-Proben zeigen die Formierung von Hohlräumen in der ursprünglich homogenen amorphen oberflächenschicht sowie deren Wachstum und Agglomeration mit zunehmender Fluenz. Als Beispiel ist in Abbildung 4.35 eine cs-SEM-Aufnahme einer bei $T_{TT} = 50 \text{ K}$ bestrahlten a-Ge-Probe dargestellt, die eine vergleichbare Volumenexpansion von $\Delta z = 470 \text{ nm}$ (vgl. Abb. 4.34) wie die in Abbildung 4.31 gezeigte, mit 185 MeV Au-Ionen bei RT und $\Theta = 45^\circ$ bestrahlte a-Ge-Probe aufweist. Es wird deutlich, dass ebenso wie bei RT-Bestrahlung die Hohlraumformierung ausschließlich in der a-Ge-Phase stattfindet und das unterliegende Substrat (c-Ge) für beide Bestrahlungstemperaturen weiterhin kristallin und frei von Defekten oder Hohlräumen ist. Die experimentellen Ergebnisse zeigen, dass die SHI-Bestrahlung von a-Ge selbst bei tiefen Temperaturen zu einer effektiven Hohlraumbildung führt. Die sich mit steigender Fluenz formierenden porösen Oberflächen-

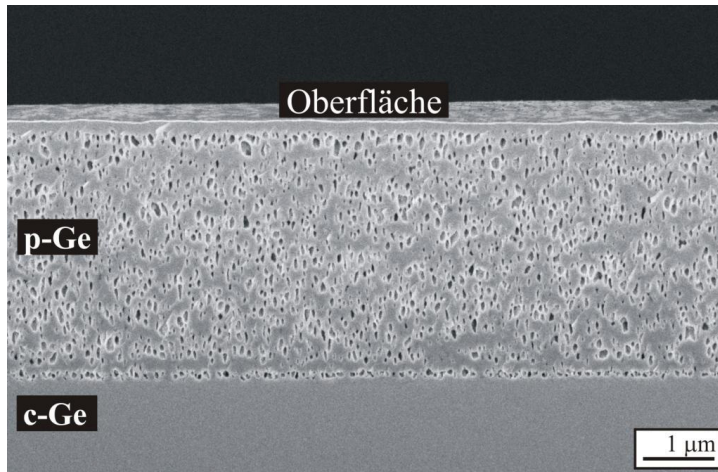


Abb. 4.35: Die cs-SEM-Aufnahme verdeutlicht die Bildung von einzelnen vergrabenen sphärischen Hohlräumen innerhalb der $d_{am} = 3.1 \mu\text{m}$ dicken a-Ge-Schicht für die Bestrahlung mit 940 MeV Au^{34+} -Ionen unter senkrechtem Ioneneinfall bei TT [206].

schichten unterscheiden sich dabei strukturell nicht von denen der bei RT bestrahlten Proben (vgl. Abb. 4.31 mit Abb. 4.35) [206].

Für Fluenzen $N_I < 3.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ wird zudem sowohl für die Bestrahlung bei TT (siehe Abb. 4.35) als auch bei RT (siehe Abb. 4.31 und 4.32a) eine dünne homogene amorphe Schicht an der Oberfläche beobachtet. Somit beginnt die Hohlraumformierung abhängig vom Einfallswinkel und der elektronischen Energiedeponierung erst in Tiefen $z > (50 \dots 100) \text{ nm}$. Schiwietz et al. berichten, dass der anfängliche Ladungszustand q der Ionen nach dem Eintritt in den Festkörper adaptiert und sich innerhalb der ersten 100 nm Weglänge ein Gleichgewichtsladungszustand \bar{q} einstellt [75]. Bei der SHI-Bestrahlung von InP führt $q < \bar{q}$ nachweisbar zu einem reduzierten elektronischen Energieeintrag ε_e an der Oberfläche, so dass erst mit Erreichen des Gleichgewichtsladungszustands innerhalb der ersten 50 nm ein Schwellwert der Energiedeponierung überschritten wird, der die Formierung von permanenten amorphen Ionenspuren bewirkt [24, 122, 207]. Folglich kann auch in a-Ge eine reduzierte Energiedeponierung infolge $q < \bar{q}$ im oberflächennahen Bereich angenommen werden, da die Hohlraumformierung bei Bestrahlung von Au-bedampften Ge-Proben nahezu direkt an der Ge-Probenoberfläche beginnt, weil bei Eintritt der Ionen in die Ge-Probe bereits $q \approx \bar{q}$ gilt. Analog den Ergebnissen zu InP deuten die Ergebnisse der EM-Analysen auf einen Schwellwert ε_e^{HRF} für die ionenstrahlinduzierte Hohlraumformierung (HRF) in der amorphen Ge-Phase hin (siehe Kap. 5.1.2.1) [203, 205].

4.2.2.3 Ergebnisse der molekulardynamischen Simulation

Der Effekt der Hohlraumformierung in a-Ge infolge hinreichend hoher Energieeinträge soll unter Berücksichtigung der experimentellen Bedingungen molekulardynamisch simuliert und mit den experimentellen Ergebnissen verglichen werden, um daraus Hinweise auf die Ursache für die Strukturmodifikation abzuleiten [208].

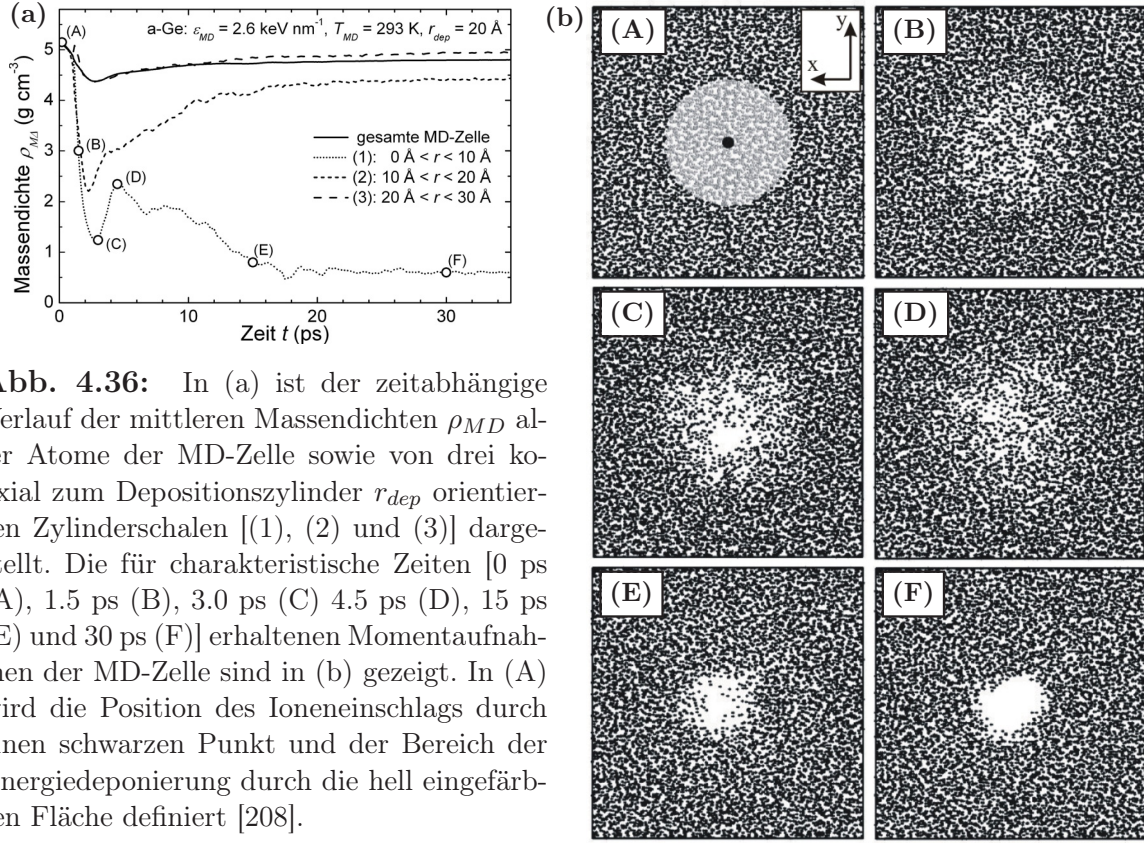


Abb. 4.36: In (a) ist der zeitabhängige Verlauf der mittleren Massendichten ρ_{MD} aller Atome der MD-Zelle sowie von drei koaxial zum Depositionszylinder r_{dep} orientierten Zylinderschalen [(1), (2) und (3)] dargestellt. Die für charakteristische Zeiten [0 ps (A), 1.5 ps (B), 3.0 ps (C), 4.5 ps (D), 15 ps (E) und 30 ps (F)] erhaltenen Momentaufnahmen der MD-Zelle sind in (b) gezeigt. In (A) wird die Position des Ioneneinschlags durch einen schwarzen Punkt und der Bereich der Energiedeponierung durch die hell eingefärbte Fläche definiert [208].

Die zeitliche Entwicklung einer aus 9000 Ge-Atomen bestehenden amorphen MD-Zelle (vgl. Kap. 3.4) infolge einer einzelnen, 1 ps dauernden Energiedeponierung im Zentrum der x-y Fläche (vgl. Abb. 4.36b) ist für die Simulationsparameter $\varepsilon_{MD} = 2.6 \text{ keV nm}^{-1}$, $T_{MD} = 293 \text{ K}$ und $r_{dep} = 20 \text{ \AA}$ in Abbildung 4.36 dargestellt [208]. Unmittelbar nach Abschluss der Energiedeponierung ($t > 1 \text{ ps}$) sinkt die in Abbildung 4.36a als Funktion der Zeit t aufgetragene Massendichte ρ_{MD} innerhalb der beiden koaxial zum Depositionszylinder orientierten Zylinderschalen (1) bzw. (2) und erreicht nach 3 ps ein lokales Minimum. Da sich die zeitliche Entwicklung von ρ_{MD} außerhalb des Depositionszylinders (Zylinderschale (3)) nicht wesentlich ändert bzw. der zeitlichen Änderung der gesamten MD-Zelle entspricht, kann geschlossen werden, dass die für die Hohlraumformierung relevanten Prozesse ausschließlich in dem in Abbildung 4.36b (A) hell eingefärbten Volumenbereich des Depositionszylinders r_{dep} stattfinden (vgl. Abb. 4.36b (A - C)). Mit fortschreitender Zeit steigt ρ_{MD} in der Zylinderschale (2) auf 86% des anfänglichen Wertes an, während im Zylinder (1) ρ_{MD} für $t > 4.5 \text{ ps}$ kontinuierlich auf 11% des Ausgangswertes absinkt. Die für charakteristische Zeiten erhaltenen Momentaufnahmen der MD-Zelle in Abbildung 4.36b verdeutlichen die zeitliche Entwicklung der Atomverteilung in der gesamten MD-Zelle und weisen innerhalb des Depositionszylinders für $t = 30 \text{ ps}$ die Formierung eines stabilen Hohlraums mit einem Durchmesser von 1.8 nm nach (siehe Abb. 4.36b (F)). Die wesentlichen

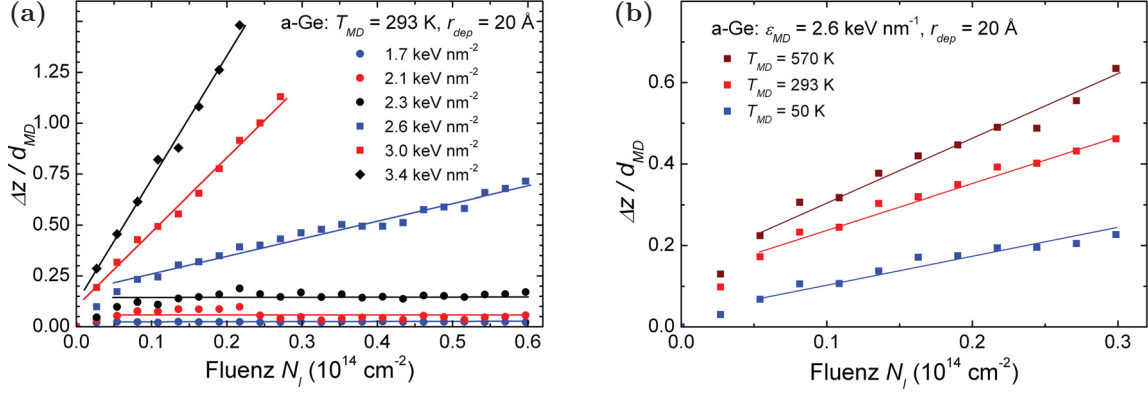


Abb. 4.37: Relative Volumenausdehnung $\Delta z/d_{MD}$ als Funktion der Fluenz für verschiedene in das System deponierte Energien ϵ_{MD} bei $T_{MD} = 293 \text{ K}$ (a) und für $\epsilon_{MD} = 2.6 \text{ keV nm}^{-1}$ bei verschiedenen Temperaturen T_{MD} (b). Die Daten wurden linear interpoliert [208].

Prozesse sind somit innerhalb 30 ps nach der Energiedeposition beendet. Aus Berechnungen der radialen Verteilungsfunktion und der Verteilung der Bindungswinkel geht hervor, dass die atomare Struktur im Volumen der MD-Zelle physikalisch identisch ist mit derjenigen vor der Energiedeposition, während die scharf definierte Grenzfläche des entstandenen Hohlraums überwiegend aus unterkoordinierten Ge-Atomen besteht. Nach einem 100 ps dauernden sogenannten Depositionszyklus sind in der MD-Zelle sowohl die Temperatur als auch der Druck auf die Anfangswerte abgesunken, während das Volumen der Zelle, basierend auf der Formierung eines ausgedehnten Hohlraums (siehe Abb. 4.36b), substantiell und dauerhaft angestiegen ist [208].

Um experimentell beobachtete fluenzabhängige Effekte mittels MD-Simulation zu untersuchen, wurden im Folgenden molekulardynamisch etwa $Z = 50 - 100$ Depositionszyklen in Folge an stochastisch bestimmten Positionen simuliert und die relativ auf die Dicke der MD-Zelle d_{MD} bezogene Volumenexpansion Δz unmittelbar vor Beginn der jeweils folgenden Energiedeposition ausgewertet [208]. Die auf diese Weise bestimmte relative Volumenausdehnung $\Delta z/d_{MD}$ ist in Abbildung 4.37a für verschiedene in das System deponierte Energien ϵ_{MD} bei RT und in (b) für verschiedene Temperaturen bei $\epsilon_{MD} = 2.6 \text{ keV nm}^{-1}$ als Funktion der Fluenz aufgetragen. Die Fluenz wurde über die Relation $N_I = Z/A_{MD}$ bestimmt, wobei $A_{MD} = 7362 \text{ Å}^2$ die während der Simulation konstant gehaltene x-y Fläche bezeichnet. Für alle mit $\epsilon_{MD} \geq 2.6 \text{ keV nm}^{-1}$ durchgeführten RT-Simulationen ergibt sich in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen (vgl. Abb. 4.30) ein linearer Verlauf von $\Delta z/d_{MD}$ mit zunehmender Fluenz, d.h. es gilt $\Delta z/d_{MD} = \xi_{MD} N_I$. Der Gradient ξ_{MD} ist umso größer, je mehr Energie innerhalb r_{dep} deponiert wurde. Die für $\epsilon_{MD} \leq 2.3 \text{ keV nm}^{-1}$ und kleine Fluenzen beobachtete geringe Volumenexpansion geht für $N_I > 0.2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ in eine Sättigung über und kann auf Punktdefekte oder sehr kleine, aber instabile Hohlräume zurückgeführt werden. Die in Abbildung 4.37b für $\epsilon_{MD} = 2.6 \text{ keV nm}^{-1}$ dargestellten

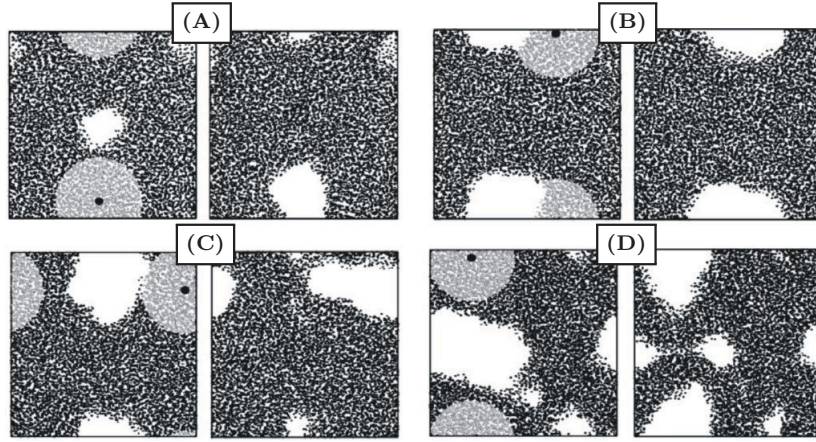


Abb. 4.38: Dargestellt sind die Momentaufnahmen der MD-Zelle jeweils vor der Energiedeponierung (linke Abbildung: Ausgangssituation, Einschlagstelle und Depositionszylinder ($r_{dep} = 20 \text{ \AA}$) sind durch einen schwarzen Punkt bzw. durch die hell eingefärbte Fläche definiert) und nach einer 100 ps dauernden Relaxation (rechte Abbildung: Endstruktur, bevor der nächste Depositionszyklus startet). Nach abgeschlossener Energiedeponierung, $t = 1 \text{ ps}$, wird die Entwicklung des Systems mit periodischen Randbedingungen für die x- und y-Raumdimension simuliert und, entsprechend den experimentellen Ergebnissen, ausschließlich eine Expansion in z-Richtung erlaubt. Die fortschreitende Entwicklung der MD-Zelle ist für $Z = 3$ (A), 5 (B), 7 (C) und 17 (D) Ionen gezeigt [208].

fluenzabhängigen Untersuchungen für verschiedene Temperaturen zeigen, dass ξ_{MD} und damit die Volumenausdehnung substantiell mit wachsender Temperatur ansteigen. Das Verhältnis der relativen Volumenausdehnung $(\Delta z/d_{MD})^{50K}/(\Delta z/d_{MD})^{293K} = 0.5$ ist in sehr guter Übereinstimmung mit dem experimentell ermittelten Wert von 0.6 (vgl. Kap. 4.2.2.2), was darauf schließen lässt, dass die MD-Simulation die Temperaturabhängigkeit der ionenstrahlinduzierten Volumenexpansion sehr gut beschreibt [208].

Die kontinuierlich ansteigende Volumenausdehnung mit wachsender Ionenbestrahlung wird durch die Formierung von neuen Hohlräumen innerhalb des Depositionszylinders (Abb. 4.38, A) und dem Wachstum von bereits vorhandenen Hohlräumen (Abb. 4.38, C) bestimmt, wobei auch die Verkleinerung von bereits existierenden Hohlräumen (Abb. 4.38, D) und die Auslöschung von Hohlräumen (Abb. 4.38, A) beobachtet werden kann [208]. Für alle durchgeführten Simulationen mit $\varepsilon_{MD} \geq 2.6 \text{ keV nm}^{-1}$ sind die Prozesse der Formierung und des Wachstums dominierend, so dass bei hohen Fluenzen die Bildung einer permanenten porösen Struktur beobachtet wird (Abb. 4.38, D). Die zeitliche und thermische Stabilität derartiger poröser Strukturen wurde durch Ausheilexperimente bei Temperaturen von $T = 293 \text{ K}$ und 1000 K überprüft. Für $T = 293 \text{ K}$ und einer Ausheildauer von $t = 2 \text{ ns}$ wurde keine Änderung der Struktur und folglich keine Änderung in $\Delta z/d_{MD}$ nachgewiesen. Die Ausheilung bei $T = 1000 \text{ K}$ bewirkt innerhalb 1 ns eine 16%ige Reduzierung der Volumenausdehnung aufgrund von Umordnungen an den Grenzflächen der porösen Struktur. Für $t > 1 \text{ ns}$ wird keine weitere Strukturmodifikation beobachtet [208].

4.2.3 Ionenstrahlinduzierte plastische Deformation

Alle unter schrägem Einfallswinkel ($\Theta > 0^\circ$) mit hochenergetischen Ionen bestrahlten a-Ge-Schichten weisen fernab von Randbereichen den in Abbildung 2.6 schematisch veranschaulichten und in der Lichtmikroskopaufnahme in Abbildung 4.29 experimentell nachgewiesenen plastischen Fließprozess auf. Dieser ist durch eine homogene laterale Verschiebung der Probenoberfläche in Richtung der Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche bestimmt, d.h. es gilt $\Delta x(z = 0) > 0$. Die Ionenstrahlinduzierte plastische Deformation von a-Ge ist somit durch eine positive Deformationsausbeute $A_0 > 0$ charakterisiert. In Abbildung 4.39 sind, basierend auf pv-SEM-Analysen, die an der Probenoberfläche des Zentralbereichs ermittelten Verschiebungen $\Delta x(z = 0)$ in Abhängigkeit von der Fluenz dargestellt [205]. Der Vergleich mit Ergebnissen der SHI-Bestrahlung von konventionellem Glas [17, 25–27, 33] und amorphem Si [36, 38] zeigt, dass sich die unter $\Theta > 0^\circ$ bestrahlten a-Ge-Proben qualitativ ähnlich verhalten. Der gemäß Gleichung 2.26 zu erwartende lineare Zusammenhang zwischen Δx und N_I konnte jedoch nicht nachgewiesen werden (siehe Abb. 4.39). Vielmehr ist ein superlinearer Anstieg der Oberflächenverschiebung mit wachsender Fluenz zu beobachten. Dies deutet auf einen beschleunigten plastischen Fließprozess hin, dessen Ursache in der effektiven, bereits bei niedrigen Fluenzen auftretenden Volumenexpansion infolge Hohlraumformierung begründet ist (siehe Abb. 4.32). Eine grundlegende Voraussetzung für die Beschreibung der plastischen Deformation durch Gleichung 2.26 ist die Konstanz des Volumens bzw. der Dichte der sich deformierenden amorphen Schicht (vgl. Kap. 2.2.2.4), die bei der SHI-Bestrahlung von a-Ge nicht erfüllt ist.

Unabhängig vom Einfluss der Hohlraumformierung wird die Abhängigkeit der Oberflächenverschiebung Δx (vgl. Gl. 2.26) von der in elektronische Prozesse deponierten Energie $\Delta x(\varepsilon_e) \propto \varepsilon_e(E, \Theta) N_I$ anhand von Abbildung 4.39 diskutiert. Der fluenzabhängige Verlauf von $\Delta x(N_I)$ ist für die SHI-Bestrahlung mit $E = 89$ MeV verglichen mit der 185 MeV Bestrahlung zu höheren Fluenzen verschoben. Dies ist auf den unterschiedlichen elektronischen Energieeintrag $\varepsilon_e(E)$ zurückzuführen, dessen Verhältnis $\varepsilon_e^{185\text{MeV}} / \varepsilon_e^{89\text{MeV}} = 1.56$ sehr gut mit dem bei gleichem Einfallswinkel (45°) und gleicher

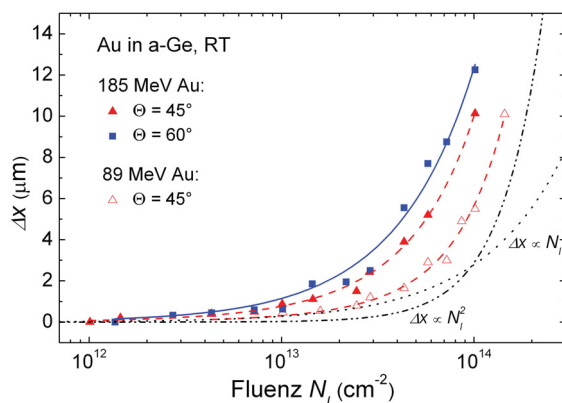


Abb. 4.39: Im Zentralbereich ermittelte Oberflächenverschiebung $\Delta x(z = 0)$ von unter schrägem Einfallswinkel ($\Theta > 0^\circ$) hochenergiebestrahlten a-Ge-Proben als Funktion der Fluenz N_I . Die funktionelle Beschreibung der Daten erfolgt mit Gleichung 5.3. Die gepunktete und die strichpunktete Linie symbolisieren den Verlauf einer linearen bzw. quadratischen Funktion [205].

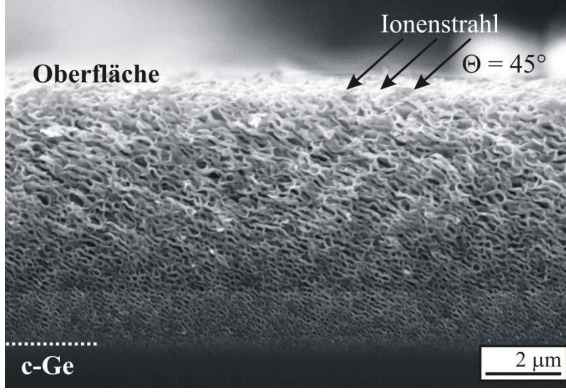


Abb. 4.40: Die cs-SEM-Aufnahme (cs-SEM-2, vgl. Abb. 4.29) einer bei RT und $\Theta = 45^\circ$ mit 89 MeV Au^{9+} -Ionen und $N_I = 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlten a-Ge-Probe verdeutlicht den ionenstrahlinduzierten plastischen Fließprozess anhand der Orientierung der Hohlräume [205].

Oberflächenverschiebung ermitteltem Verhältnis der Fluenzen $N_I^{89\text{MeV}}/N_I^{185\text{MeV}} \approx 1.6$ übereinstimmt. Bei der Bestrahlung mit gleicher Energie $E = 185 \text{ MeV}$ aber unterschiedlichen Einfallswinkeln Θ ist der fluenzabhängige Verlauf von $\Delta x(N_I)$ für Bestrahlungen unter $\Theta = 45^\circ$ verglichen mit 60° zu höheren Fluenzen verschoben. Das Verhältnis der Fluenzen bei gleicher Oberflächenverschiebung beträgt $N_I^{45^\circ}/N_I^{60^\circ} \approx 1.3$ und kann ebenfalls im Wesentlichen durch die unterschiedliche, vom Einfallswinkel abhängige elektronische Energiedeponierung $\varepsilon_e^{60^\circ}/\varepsilon_e^{45^\circ} = 1.4$ erklärt werden. Der direkte Einfluss des Einfallswinkels auf die Verschiebung $\Delta x(\Theta) \propto \sin(2 \times \Theta)N_I$ ist bei den in dieser Arbeit verwendeten Einfallswinkeln gering, da gilt $\sin(2 \times 60^\circ)/\sin(2 \times 45^\circ) = 0.9$.

In y-Richtung wurde kein ionenstrahlinduziertes plastisches Fließen beobachtet, d.h. $v_y = \Delta y = 0$. Eine plastische Deformation in z-Richtung, die ebenfalls über die Normalkomponente $\dot{\varepsilon}_{zz}^S$ eine Volumenänderungsrate $dV/V = Sp(\underline{\dot{\varepsilon}}) \neq 0$ bewirken kann (siehe Kap. 2.2.2.4), wurde aufgrund der extremen Volumenausdehnung infolge der Hohlraumformierung nicht nachgewiesen. Die unter $\Theta = 0^\circ$ bestrahlten a-Ge-Schichten sowie die unter senkrechtem als auch schrägem Ioneneinfall bestrahlten c-Ge-Proben weisen keine messbare plastische Deformation auf [205].

Die cs-SEM-Aufnahme einer unter $\Theta = 45^\circ$ mit 89 MeV Au-Ionen bestrahlten a-Ge-Probe ist in Abbildung 4.40 gezeigt, wobei der Querschnitt der Probe parallel zur Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche orientiert ist (cs-SEM-2, vgl. Abb. 4.29). Anhand dieser Geometrie wird im Gegensatz zu den in Abbildung 4.32 dargestellten cs-SEM-Untersuchungen eine bevorzugte Orientierung der Hohlräume innerhalb der ursprünglich amorphen Oberflächenschicht deutlich. Die Ausrichtung der entstandenen porösen Struktur stimmt nicht mit der Richtung der Ionenbahn überein, entlang derer die Energie in das elektronische System deponiert wird, sondern kann vielmehr auf einen homogenen lateral in positive Richtung ablaufenden Massentransport infolge ionenstrahlinduziertem plastischen Fließen zurückgeführt werden [205].

Die Ergebnisse der Bestrahlung von a-Ge bei Temperaturen von $T_{TT} = 50 \text{ K}$ und $\Theta > 0^\circ$ zeigen ebenfalls eine nichtsättigende anisotrope plastische Deformation mit positivem Vorzeichen, wobei auch die bei tiefen Temperaturen stattfindende Formierung von Hohlräumen (vgl. Kap. 4.2.2.2) in einem beschleunigten Fließprozess resultiert [206].

Kapitel 5

Diskussion

5.1 Ionenstrahlinduzierte Hohlraumbildung

5.1.1 Nukleare Energiedeponierung (LEI-Bestrahlung)

Unabhängig von der Ionenenergie bewirkt die Bestrahlung von c-Ge mit schweren Ionen die Formierung von Schäden infolge direkter nuklearer Streuung an den Gitteratomen. Für die in dieser Arbeit verwendeten Ionenarten und kinetischen Energien führt dies bei Bestrahlung mit Fluenzen von $N_I^{am} \approx 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ zur Amorphisierung des Materials im Bereich um das Maximum der nuklearen Energiedeponierung (vgl. Kap. 4.1.1.1) [196]. Die mit wachsender Fluenz zunehmende Ausbreitung der amorphen Tiefenschicht resultiert in der Formierung einer homogenen amorphen Oberflächenschicht ohne Einschlüsse oder Hohlräume. Für alle niederenergetischen Bestrahlungen mit Fluenzen zwei Größenordnungen oberhalb N_I^{am} wird eine deutliche Reduzierung der Reflektivität sowie eine extreme, mehrere Mikrometer umfassende vertikale Volumenausdehnung der bestrahlten Probenoberfläche beobachtet. Deren Ursache ist mittels systematischer EM-Analyse auf die Formierung und das Wachstum von Hohlräumen an der Probenoberfläche und der sich bei fortwährender Bestrahlung strukturell und dimensionell identisch entwickelnden porösen Oberflächenschicht zurückzuführen [196]. Eine Erklärung für die ionenstrahlinduzierte Hohlraumformierung an der Probenoberfläche und die für Hochfluenzbestrahlung erstmals experimentell nachgewiesene Abhängigkeit der Bildung und Entwicklung vergrabener Hohlräume von der Ionenart soll im Folgenden diskutiert werden [196].

5.1.1.1 Energetisch bevorzugte Vakanzagglomeration

In der Literatur werden die in der amorphen Ge-Phase beobachteten ionenstrahlinduzierten morphologischen Strukturmodifikationen auf die energetisch bevorzugte Agglo-

meration von strahlungsinduzierten Vakanzen bzw. vakanzartigen Defekten zurückgeführt [46–50, 56]. Die Bildung von makroskopischen Hohlräumen in ionenbestrahlten kristallinen Metallen kann gut mit dem Vakanz-Agglomerations-Modell erklärt werden. Die dabei erforderliche Konzentration von stabilen, nicht mit den Zwischengitteratomen (im Folgenden Interstitials genannt) rekombinierenden Vakanzen wird durch die Existenz von ausgedehnten Defekten wie Versetzungsschleifen oder Korngrenzen diskutiert, an denen die interstitielle Komponente des induzierten Frenkel-Defekts effektiv absorbiert [209, 210]. In homogenen amorphen Materialien existieren keine ausgedehnten Defekte, an denen die Interstitials eingefangen werden können [211]. Trotz der Schwierigkeit der Definition einzelner Defekte in amorphen Materialien zeigen MD-Simulationen für eine basierend auf dem Lennard-Jones-Wechselwirkungspotential beruhende, amorphe MD-Zelle, dass bei Ionenbestrahlung von ungeordneten Strukturen temporär stabile Frenkel-Defekte gebildet werden [212]. Weiterführende Experimente deuten darauf hin, dass die Interstitials sehr schnell infolge kleiner lokaler Umordnungen mit ihren benachbarten Atomen [212] oder infolge von Rekombinationsprozessen an Grenzflächen (Oberflächen, Korngrenzen bzw. Schichtgrenzen) [211] verschwinden, während die verbleibenden Vakanzen eine deutlich höhere Lebensdauer aufweisen. Simulationsexperimente an kovalent gebundenen amorphen Systemen weisen die Stabilität dieser Vakanzen oder kleiner Vakanz-Cluster nach, die ebenfalls nicht durch statische Relaxationsprozesse verschwinden [213]. Der grundlegende Prozess der Diffusion und Agglomeration von Vakanzen basiert auf einer substantiell längeren Lebenszeit der Vakanzen verglichen mit den Interstitials [212] sowie der von Wang und Birtcher angenommenen Eliminierung und Reduzierung von ungesättigten Ge-Bindungen an den Oberflächen der Vakanz-Cluster [50]. Hochfluenzbestrahlungen führen zur Bildung von ausgedehnten Hohlräumen infolge stetigen Wachstums dieser Cluster durch kontinuierliche Absorption der bei fortlaufender Bestrahlung induzierten Vakanzen und resultieren bei hohen Fluenzen in einer definierten, sich stetig ausdehnenden, porösen Schicht [196].

In Abbildung 5.1 ist die experimentell ermittelte Ausdehnung der porösen Oberflächenschicht und der vergrabenen porösen Schicht als Funktion der normierten Ionenfluenz n_{dpa} aufgetragen [196]. Für die Berechnung von n_{dpa} (vgl. Gl. 2.7) wurde ein über die amorphe Schicht $d_{am} = \alpha d_p$ gemittelter Wert von N_{displ} verwendet. Für die vergrabene poröse Schicht wurde bei der Berechnung von n_{dpa} zudem die Schwellwert-Fluenz N_I^S , bei der die Hohlraumformierung im Bereich der projizierten Ionenreichweite R_p beginnt (vgl. Tab. 4.1), von N_I subtrahiert, so dass für die vergrabene poröse Schicht gilt: $n_{dpa} = \frac{N_{displ}}{N_0}(N_I - N_I^S)$. Beide ionenstrahlinduzierten porösen Schichten dehnen sich trotz der unterschiedlichen Bestrahlungsparameter (Ionenart, Energie, Energie-deponierung, Eindringtiefe und Einfallrichtung) linear mit zunehmender normierter Fluenz aus (vgl. Abb. 5.1). Der funktionelle Verlauf der Schichtdicke $d_p(n_{dpa})$ kann

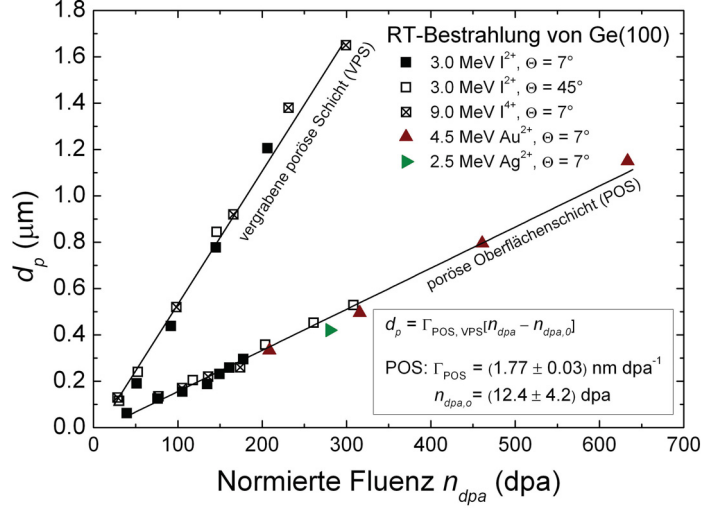


Abb. 5.1: Die infolge niederenergetischer Bestrahlung bei RT in a-Ge ermittelten Ausdehnungen d_p der porösen Oberflächenschicht (POS) und der vergrabenen porösen Schicht (VPS) als Funktion der normierten Fluenz n_{dpa} . Die Daten wurden linear interpoliert [196].

somit für beide poröse Schichten durch jeweils einen charakteristischen Gradienten Γ beschrieben werden. Die Formierung und das Wachstum der Hohlräume ist demnach einzig auf den nuklearen Energieeintrag $n_{dpa}(N_{displ}(\varepsilon_n))$ zurückzuführen. Da der nukleare Energieeintrag ε_n die Bildung von Vakanzen und Interstitials bei niederenergetischer Bestrahlung dominiert (vgl. Kap. 2.2.1), bestätigen die im Rahmen dieser Arbeit gewonnenen Ergebnisse (siehe Abb. 5.1) das Modell der strahlungsinduzierten Vakanzagglomeration. Aus der linearen Regression für die poröse Oberflächenschicht (POS) lässt sich ein materialspezifischer Schwellwert für die Energiedeponierung $n_{dpa,0}$ ableiten, oberhalb dessen die Hohlraumformierung in a-Ge bei RT-Bestrahlung mit schweren Ionen beginnt [196]:

$$d_p(\varepsilon_n, T) = \Gamma_{POS}(RT)[n_{dpa} - n_{dpa,0}] \quad \text{mit} \quad n_{dpa,0} = (12.4 \pm 4.2) \text{ dpa}. \quad (5.1)$$

Im Fall der Bestrahlung mit 3 MeV I-Ionen unter $\Theta = 7^\circ$ wird eine Fluenz von $N_I(n_{dpa,0}) = (2.2 \pm 0.7) \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ abgeschätzt, die sehr gut mit der experimentell ermittelten Schwellwert-Fluenz N_I^S (vgl. Tab. 4.1) übereinstimmt. Die Ergebnisse der Bestrahlung von Ge mit $E = 380 \text{ keV}$ zeigen ebenfalls eine lineare Abhängigkeit der kontinuierlichen Ausdehnung der porösen Oberflächenschicht von der normierten Fluenz (nicht gezeigt) [203]. Die in elektronische Prozesse deponierte Energie kann aufgrund der Tiefenverteilung von $\varepsilon_e(z)$ als wesentlicher Beitrag zur Hohlraumformierung in a-Ge bei niederenergetischer Bestrahlung mit Energien von einigen hundert keV bis einige MeV ausgeschlossen werden (siehe auch Kap. 5.1.2). Der elektronische Energieeintrag ist an der Probenoberfläche maximal und sinkt mit zunehmender Tiefe kontinuierlich ab. Somit kann die Bildung und rapide Ausdehnung der vergrabenen porösen Schicht bzw. die Bildung der netzwerkartigen Struktur im Tiefenbereich der Ionenreichweite nicht durch den elektronischen Energieeintrag ε_e erklärt werden [196].

5.1.1.2 Hohlraumformierung an der Probenoberfläche

Die Probenoberfläche ist eine defektreiche Grenzschicht, die viele ungesättigte Ge-Bindungen aufweist und folglich eine effektive Senke für die im oberflächennahen Bereich induzierten Ge-Interstitials darstellt [214–217]. Gemäß dem Modell von Nitta diffundieren die verbleibenden Vakanzen und agglomerieren nahe der Probenoberfläche [186]. Die bei diesem Prozess induzierten Spannungen führen zu einer Volumenexpansion, die lateral durch das umgebende ungeschädigte Material mechanisch eingeschränkt ist und folglich in einer dominierenden Ausdehnung senkrecht zur Probenoberfläche sowie der Formierung schlauchartiger Hohlraumstrukturen resultiert. Aktuelle Computersimulationen, die die bestrahlungsinduzierten Oberflächenmodifikationen in amorphen Materialien untersuchen, gehen in ihrem semiempirischen Ansatz von einer Massendichteverteilung in der Simulationszelle aus, deren lokale zeitliche Entwicklung durch eine nichtlineare Differentialgleichung gegeben ist, die eine Änderung der Dichteverteilung durch die Minimierung der freien Energie des Systems beschreibt [218]. Unter Berücksichtigung der freien Energie, der Redeposition von gesputterten Atomen, der Energie der Interstitials sowie der Erzeugung und Eliminierung von Vakanzen und deren Rekombination mit Interstitials erfolgt die Simulation der Bestrahlung durch stochastisch in die Zelle eingebrachte Vakanzen, was dem Prozess der nuklearen Energiedeposition entspricht. Die morphologischen Änderungen sowie die Dimension der simulierten Struktur [218] stimmen sehr gut mit den in dieser Arbeit experimentell beobachteten Oberflächenstrukturen überein und bestätigen ebenfalls die Annahme der durch nukleare Prozesse induzierten Vakanzagglomeration als grundlegenden Mechanismus [196].

5.1.1.3 Hohlraumformierung im Bereich der projizierten Ionenreichweite

Im Inneren des Festkörpers, d.h. weit entfernt von definierten Grenzflächen und effektiven Senken für die interstitielle Komponente des Frenkel-Defekts, wird die effektive Bildung von ausgedehnten stabilen Vakanz-Clustern in der Tiefe der maximalen nuklearen Energiedeposition durch die Rekombination von Interstitial und Vakanz verhindert. Die im Fall der Bestrahlung mit I-Ionen bei hohen Fluenzen beobachteten vergrabenen sphärischen Hohlräume sind aufgrund ihrer Entstehung im Bereich der projizierten Ionenreichweite R_p auf die mehrere Atomprozent betragende Fremdatomkonzentration (Iod-Interstitials) zurückzuführen [196]. Eine hohe Anzahl an implantierten, aber nur schwach gebundenen interstitiellen Fremdatomen führt einerseits zu mechanischen Spannungen und induziert andererseits eine Vielzahl an ungesättigten Bindungen [211]. Ungesättigte Ge-Bindungen stellen daher effektive Senken für die durch nukleare Energiedeposition induzierten Vakanzen dar, so dass diese an den Defekten infolge energetischer Minimierung von ungesättigten Ge-Bindungen zunehmend agglomerieren, wäh-

rend die induzierten Ge-Interstitials durch lokale Umordnungen oder Rekombinationsprozesse verschwinden. Dieser fremdatominduzierte Prozess führt bei Bestrahlung mit I-Ionen im Energiebereich $E = (3 \dots 9)$ MeV zur Formierung einer definierten, aus sphärischen Hohlräumen bestehenden porösen Tiefenschicht (vgl. Abb. 4.7) und bewirkt bei Bestrahlung mit I-Ionen der Energie $E = 380$ keV die Formierung einer hochporösen netzwerkartigen Struktur infolge lokal sehr hoher Fremdatomkonzentration (vgl. Abb. 4.25a) [196, 203]. Ein ähnlicher Zustand wurde experimentell durch die Beschichtung von Ge-Proben realisiert, bei denen ebenfalls eine ionenstrahlinduzierte Hohlraumformierung aufgrund der hohen Anzahl ungesättigter Ge-Bindungen und Defekten an der Grenzschicht erfolgt [49, 52].

Im Fall der Ag- und Au-Bestrahlung weisen Untersuchungen zur Diffusion dieser Ionen in Ge auf deren Einbau als substitutionelle Störstellen durch die Rekombination mit Vakanzen hin [219]. Bei Au-dotierten Ge-Clustern werden ungesättigte Bindungen der Ge-Atome vollständig eliminiert, wenn das Au-Atom ganz von der Ge-Matrix umschlossen ist [220]. Diese Ergebnisse implizieren, dass in a-Ge, welches weiterhin eine definierte, auf kovalenten Bindungen beruhende Nahordnung aufweist (siehe Kap. 2.3.1.2, [165, 166]), die Ag- und Au-Atome über einen interstitiell kontrollierten dissoziativen Mechanismus diffundieren [221, 222], in die Ge-Matrix eingebaut werden und so zur Reduzierung sowohl der Vakanzkonzentration als auch der Anzahl ungesättigter Ge-Bindungen beitragen. Stabile, ausgedehnte Hohlräume im Bereich der projizierten Ionenreichweite R_p werden somit bei Bestrahlung mit Ag- und Au-Ionen nicht gebildet [196].

5.1.1.4 Hohlraumformierung bei tiefen Temperaturen

Die bei tiefen Temperaturen dramatisch reduzierte thermische Beweglichkeit der Frenkel-Defekte [98] sowie die nachgewiesene Formierung von drei- und fünffach-kooordinierten Ge-Atomen [161] verhindert die Bildung von Vakanz-Clustern und somit die Formierung von ausgedehnten Hohlräumen an der Probenoberfläche. Die defekt- und fremdatomreiche Schicht im Bereich der projizierten Ionenreichweite R_p begünstigt auch bei Bestrahlung bei tiefen Temperaturen die Agglomeration von strahlungsinduzierten Vakanzen. Die bei tiefen Temperaturen eingeschränkte Beweglichkeit der Vakanzen führt erst bei hohen Fluenzen zur Bildung von kleinen, aber zeitlich und thermisch stabilen Hohlräumen. Temperaturabhängige Bestrahlungen von Ge mit Eigenatomen und Fluenzen bis $N_I = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ zeigen unabhängig von der Bestrahlungstemperatur keine Formierung von vergrabenen Hohlräumen im Bereich der projizierten Ionenreichweite $R_p \approx 500 \text{ nm}$ [51]. Dies bestätigt den in Kapitel 5.1.1.3 diskutierten Prozess, dass keine ionenstrahlinduzierte Vakanzagglomeration in a-Ge ohne hinreichend hohe Konzentration von ungesättigten Ge-Bindungen infolge fremdatominduzierter Defekte stattfindet, für einen weiten Temperaturbereich $T = (90 \dots 800) \text{ K}$ experimentell.

5.1.2 Elektronische Energiedeponierung (SHI-Bestrahlung)

5.1.2.1 Schwellwert der elektronischen Energiedeponierung

Die bei Bestrahlung mit Energien von einigen hundert MeV über die gesamte a-Ge-Oberflächenschicht induzierten Hohlräume können nicht durch Agglomeration von strahlungsinduzierten Vakanzen infolge nuklearer Energiedeponierung ε_n erklärt werden, da ε_n im Bereich der amorphen Schicht vernachlässigbar klein ist (vgl. Abb. 3.3). Im Folgenden werden die Ergebnisse der Ionenbestrahlung [205] und MD-Simulation [208] in Abhängigkeit von der elektronischen Energiedeponierung diskutiert und der zugrunde liegende Mechanismus der Hohlraumformierung erläutert.

Experimentell bestimmter Schwellwert

Die unter verschiedenen experimentellen Bestrahlungsbedingungen beobachtete linear ansteigende Volumenausdehnung $\Delta z = \xi(\varepsilon_e)N_I$ (siehe Kapitel 4.2.2.1, Abschnitt A) deutet bereits auf eine signifikante Abhängigkeit der ionenstrahlinduzierten Hohlraumformierung von der in elektronische Prozesse deponierten Energie hin. Die basierend auf Abbildung 4.30 ermittelten und in Tabelle 4.3 aufgelisteten Gradienten ξ sind in Abbildung 5.2a als Funktion der elektronischen Energiedeponierung ε_e dargestellt. Dabei wurden die für verschiedene Bestrahlungsparameter bestimmten Werte von ξ jeweils über die gesamte Ausdehnung der a-Ge-Schicht gemittelten Wert der Energiedeponierung $\overline{\varepsilon_e}$ (siehe Tab. A.1) aufgetragen. In Abbildung 5.2a wird deutlich, dass der Gradient ξ linear mit zunehmender elektronischer Energiedeponierung ansteigt. Zudem wird durch die Extrapolation der linearen Regression auf $\xi = 0$ erstmalig für die ionenstrahlinduzierte Hohlraumformierung (HRF) die Existenz eines materialspezifischen Schwellwertes der elektronischen Energiedeponierung ε_e^{HRF} nachgewiesen und quantifiziert [205]:

$$\xi(\varepsilon_e, RT) = \Gamma_{SHI}(RT)[\varepsilon_e - \varepsilon_e^{HRF}] \quad \text{mit} \quad \varepsilon_e^{HRF} = (10.5 \pm 1.0) \text{ keV nm}^{-1}. \quad (5.2)$$

Dieser für RT-Bestrahlungen bestimmte Schwellwert ε_e^{HRF} , ab dem die Volumenexpansion bzw. die Hohlraumformierung in a-Ge einsetzt, wird durch die bei gleicher Fluenz $N_I = 4.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ermittelten, ebenfalls linear mit ε_e ansteigenden Volumenausdehnungen Δz bestätigt (siehe Abb. 5.2a, rechte Ordinatenachse) [205].

Molekulardynamisch bestimmter Schwellwert

Die Ergebnisse der MD-Simulation weisen bereits in Abbildung 4.37 auf die Existenz eines definierten Schwellwertes der deponierten Energie hin, da sich für Energieeinträge $\varepsilon_{MD} \leq 2.3 \text{ keV nm}^{-1}$ keine Hohlräume gebildet haben, d.h. es gilt $\xi_{MD}(\varepsilon_{MD} \leq 2.3 \text{ keV nm}^{-1}) = 0$. Die für unterschiedlich große MD-Zellen ermittelten

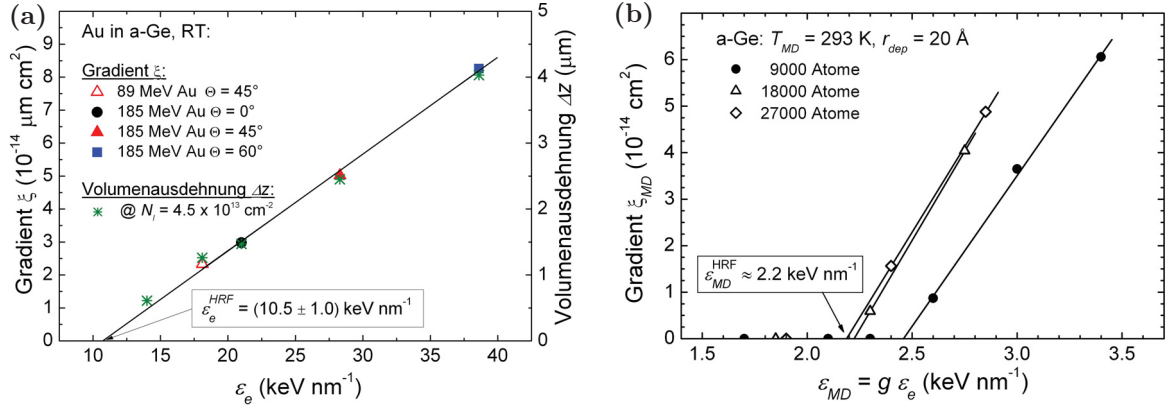


Abb. 5.2: In (a) sind der Gradient ξ sowie die bei einer Fluenz von $N_I = 4.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ermittelten vertikalen Volumenausdehnungen Δz (siehe Tab. 4.3) als Funktion der elektronischen Energiedeposition ϵ_e für die RT-Schwerionenbestrahlung von $d_{am} = 3.1 \mu\text{m}$ dicken a-Ge-Oberflächenschichten dargestellt [205]. In (b) ist der für unterschiedlich große MD-Zellen ermittelte Gradient ξ_{MD} als Funktion der innerhalb des Depositionszylinders $r_{dep} = 20 \text{ \AA}$ deponierten Energie ϵ_{MD} aufgetragen [208]. Die aus der linearen Regression gewonnenen Werte ϵ_e^{HRF} bzw. ϵ_{MD}^{HRF} weisen auf einen materialspezifischen Schwellwert für die ionenstrahlinduzierte Hohlraumformierung in a-Ge hin, oberhalb dem die Volumenausdehnung linear mit der in das System deponierten Energie ansteigt.

Gradienten ξ_{MD} sind in Tabelle 5.1 aufgelistet und in Abbildung 5.2b als Funktion der innerhalb des Depositionszylinders deponierten Energie ϵ_{MD} aufgetragen [208]. Analog zu den experimentellen Ergebnissen (vgl. Abb. 5.2a) zeigt sich, dass die Volumenausdehnung oberhalb eines Schwellwertes ϵ_{MD}^{HRF} einen linearen Zusammenhang mit der in das System deponierten Energie aufweist, wobei ϵ_{MD}^{HRF} bei $\approx 2.2 \text{ keV nm}^{-1}$ mit steigender Anzahl der bei der Simulation berücksichtigten Atome konvergiert [208]. Aus der Relation $\epsilon_{MD}^{HRF} / \epsilon_e^{HRF} = g$ (vgl. Kap. 3.4) folgt $g = 0.21$ für den relativen Anteil der vom elektronischen ins atomare System eingekoppelten Energie. Der aus dem Vergleich von

Tab. 5.1: Die für unterschiedlich große MD-Zellen bei einer Temperatur von $T_{MD} = 293 \text{ K}$ berechneten Werte der Gradienten ξ_{MD} in Abhängigkeit von der innerhalb des Depositionszylinders deponierten Energie ϵ_{MD} .

ϵ_{MD} (keV nm^{-1})	ξ_{MD} (10^{-14} cm^2)	ϵ_{MD} (keV nm^{-1})	ξ_{MD} (10^{-14} cm^2)	ϵ_{MD} (keV nm^{-1})	ξ_{MD} (10^{-14} cm^2)
9000 Atome		18000 Atome		27000 Atome	
1.70	0.0	1.85	0.0	1.90	0.0
2.10	0.0	2.30	0.59	2.40	1.56
2.30	0.0	2.75	4.04	2.85	4.88
2.60	0.87				
3.00	3.65				
3.40	6.06				

Simulation und Experiment abgeschätzte Wert g liegt somit in derselben Größenordnung wie die basierend auf der Analyse von SHI-induzierten Spurradien gewonnenen Werte, die für alle untersuchten Halbleiter einen Wert von $g \approx 0.1$ annehmen [130].

5.1.2.2 Hohlraumformierung im Ge-Substrat

Im Folgenden wird die bei Hochfluenzbestrahlungen von a- und c-Ge auftretende Formierung vergrabener Hohlräume in der Tiefe $z_p(E = 185 \text{ MeV Au}, \Theta = 45^\circ) \approx 6.5 \text{ } \mu\text{m}$ diskutiert. In Abbildung 5.3 ist das Tiefenprofil einer mit 185 MeV Au-Ionen und $\Theta = 45^\circ$ bestrahlten c-Ge-Probe dem korrespondierenden tiefenabhängigen Verlauf von $\varepsilon_n(z)$ und $\varepsilon_e(z)$ gegenübergestellt [205]. Es wird deutlich, dass die Hohlräume nicht in der Tiefe des maximalen nuklearen Energieeintrags $\varepsilon_n^{max}(z = 10 \text{ } \mu\text{m})$ oder der projizierten Ionenreichweite R_p entstehen. Somit kann ein auf Vakanzagglomeration basierender Mechanismus an defekt- bzw. fremdatomreichen Schichten (vgl. Kap. 5.1.1) ausgeschlossen werden. Wie in Kapitel 4.2.2.1 erläutert, resultiert der nukleare Energieeintrag infolge elastischer Stöße mit den Ge-Atomen für Fluenzen $N_I > 7.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ in einer ausgedehnten, ungefähr 5 μm dicken amorphen Tiefenschicht (siehe d_{am} in Abb. 5.3). Der mittels SRIM2008 berechnete Wert für den elektronischen Energieeintrag $\varepsilon_e(z)$ beträgt in der Tiefe der Hohlraumformierung $\varepsilon_e(z_p) \approx 10.5 \text{ keV nm}^{-1}$ (siehe Abb. 5.3) und zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit dem in a-Ge experimentell bestimmten Schwellwert für die ionenstrahlinduzierte Hohlraumformierung $\varepsilon_e(z_p) = \varepsilon_e^{HRF}$ [205]. Folglich entstehen vergrabene poröse Schichten in SHI-bestrahlten c-Ge-Proben, wenn das anfänglich kristalline Material durch den in der Tiefe dominierenden nuklearen Energieeintrag amorphisiert wurde *und* die in elektronische Prozesse deponierte Energie den Schwellwert von $\varepsilon_e^{HRF} = (10.5 \pm 1.0) \text{ keV nm}^{-1}$ überschreitet [205]. Da sich eine ausgedehnte amorphe Tiefenschicht erst bei einer hinreichend hohen Fluenz bildet, steigt die Volumenausdehnung der c-Ge-Proben über einen weiten Fluenzbereich aufgrund der kontinuierlich induzierten strukturellen Dichteänderung nur leicht, jedoch für Fluenzen $N_I > 7.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ durch einsetzende Hohlraumformierung deutlich an (siehe Abb. 4.30). Für Tiefen $z > 6.5 \text{ } \mu\text{m}$ werden keine Hohlräume in der amorphen Ge-Phase beobachtet, da der elektronische Energieeintrag ε_e in diesem Tiefenbereich kleiner als der für die Hohlraumformierung ermittelte Schwellwert ε_e^{HRF} ist (vgl. Abb. 5.3). Dies belegt zudem, dass die elektronische Energiedeponierung mit Werten $\varepsilon_e \lesssim 10 \text{ keV nm}^{-1}$ keinen effektiven Einfluss auf die Hohlraumformierung bei niederenergetischer Bestrahlung hat. Die maximale Dicke der porösen Tiefenschicht hängt von der maximalen ionenstrahlinduzierten Ausdehnung der vergrabenen amorphen Tiefenschicht in Richtung der Probenoberfläche ab. Die Ausdehnung wird dabei durch die jeweils komplementären tiefenabhängigen Prozesse der Schädenbildung infolge nuklearer Energiedeponierung $\varepsilon_n(z)$ und der mit zunehmender elektronischer

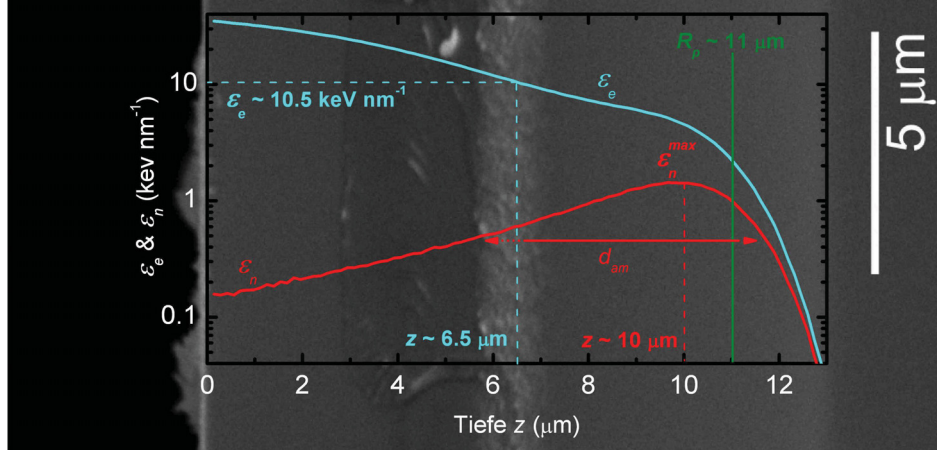


Abb. 5.3: Die cs-SEM-Aufnahme einer bei RT und $\Theta = 45^\circ$ mit 185 MeV Au^{13+} -Ionen bestrahlten c-Ge-Probe ($N_I = 1.5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$) verdeutlicht die Bildung einer vergrabenen porösen Schicht in der Tiefe $z_b \approx 6.5 \mu\text{m}$. Zusätzlich sind die entsprechenden tiefenabhängigen Verläufe der mittels SRIM2008 [66, 67] berechneten nuklearen (ε_n , durchgezogene rote Linie) und elektronischen (ε_e , durchgezogene blaue Linie) Energiedeposition sowie die Tiefe der projizierten Ionenreichweite (R_p , grüne Linie) eingezeichnet [205].

Energiedeposition $\varepsilon_e(z)$ einsetzenden effektiven Schädenausheilung bestimmt (vgl. Kap. 2.3.2.1). Experimente zur Ausheilung von Strahlenschäden in Ge mittels lokal hoher elektronischer Energiedeposition [24, 173, 174] zeigen, dass für die in dieser Arbeit durchgeführten Bestrahlungen auch für Fluenzen $N_I > 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ keine ionenstrahlinduzierte Amorphisierung bis $z = 3.1 \mu\text{m}$ zu erwarten ist und demnach die porösen Schichten stets durch eine definierte kristalline Ge-Schicht separiert bleiben. Die langjährige Diskussion über die Formierungstiefen von vergrabenen porösen Schichten infolge SHI-Bestrahlung von c-Ge [57, 58] kann nun erfolgreich durch den in dieser Arbeit erstmals ermittelten Schwellwert erklärt werden, da sich alle porösen Schichten erst bei hinreichend hoher Fluenz ($N_I = (10^{14} \dots 10^{15}) \text{ cm}^{-2}$), also nach Amorphisierung durch ε_n , und in Tiefen z , in denen $\varepsilon_e(z) > 10 \text{ keV nm}^{-1}$ gilt, gebildet haben [57, 58, 205].

5.1.2.3 Hohlraumformierung infolge einer Schockwelle

Der aus MD-Simulationen ermittelte zeitabhängige Temperaturverlauf (d.h. die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Temperatur-Wellenfront) außerhalb des Depositionszylinders in 1 Å dicken, coaxial zum Depositionszylinder orientierten Zylinderschalen ist in Abbildung 5.4a dargestellt [208]. Durch die Einteilung in i dünne Zylinderschalen wird die räumliche und zeitliche Ausbreitung der Temperatur innerhalb der MD-Zelle unmittelbar nach der Energiedeposition, d.h. für $t > 1 \text{ ps}$, deutlich. Die Temperatur-Wellenfront (TW) wird definiert durch die Position r_i^{TW} und die Zeit t^{TW} , bei der die Temperatur T^{TW} in der i -ten Zylinderschale auf $T_i^{TW} = 1/2 \times T_i^{max}$ (siehe schwarze Punkte in Abb. 5.4a) angestiegen ist. In Abbildung 5.4b ist die Po-

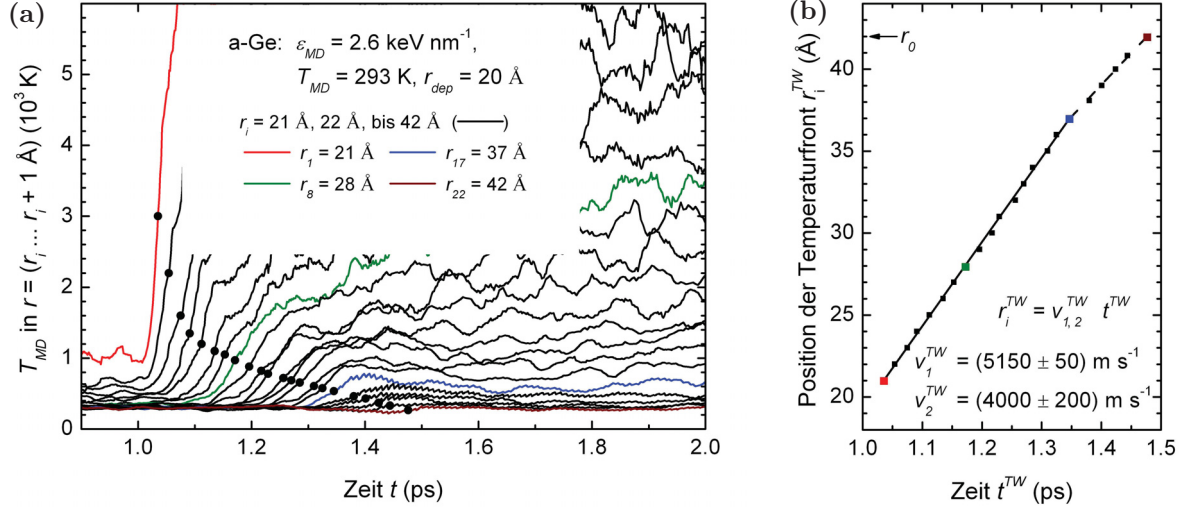


Abb. 5.4: Räumliche und zeitliche Entwicklung der Temperatur aller Atome innerhalb von 1 \AA dicken, coaxial zum Depositionszylinder orientierten Zylinderschalen (a) nach einer einzelnen Energiedeponierung (Simulationsparameter: $\varepsilon_{MD} = 2.6 \text{ keV nm}^{-1}$, $T = 293 \text{ K}$ und $r_{dep} = 20 \text{ \AA}$). Die Zeit t^{TW} , bei der die Temperatur der Wellenfront $T_i^{TW} = 1/2 \times T_i^{max}$ erreicht hat, wird durch die schwarzen Punkte charakterisiert. In (b) ist die Wellenfront-Position r_i^{TW} über der Zeit t^{TW} aufgetragen. Die lineare Regression der zwei charakteristischen Bereiche wird durch die gestrichelte und die durchgezogene Linie verdeutlicht. Der Radius $r_0 = 42.9 \text{ \AA}$ kennzeichnet die halbe Ausdehnung der MD-Zelle in x-Richtung [208].

sition der Wellenfront r_i^{TW} als Funktion der Zeit t^{TW} aufgetragen. Es können zwei durch unterschiedliche Gradienten v^{TW} charakterisierte lineare Bereiche definiert werden [208]. Die Wellenfront breitet sich bis zu $t^{TW} = 1.35 \text{ ps}$ mit einer Geschwindigkeit von $v_1^{TW} = (5150 \pm 50) \text{ m s}^{-1}$ aus, während der lineare Verlauf für $t^{TW} > 1.35 \text{ ps}$ durch einen kleineren Gradienten $v_2^{TW} = (4000 \pm 200) \text{ m s}^{-1}$ charakterisiert ist. Bei $t^{TW} = 1.5 \text{ ps}$ erreicht die Wellenfront den Rand der MD-Zelle, $r_{22}^{TW} = r_0$ [208].

Der Vergleich mit der von Cox-Smith et al. in a-Ge experimentell bestimmten Schallgeschwindigkeit von $v_S = (4000 \pm 50) \text{ m s}^{-1}$ [223] zeigt, dass sich die Temperatur-Wellenfront in den ersten, den Depositionszylinder umschließenden Zylinderschalen mit Überschallgeschwindigkeit, $v_1^{TW} > v_S$, und ab $t^{TW} = 1.35 \text{ ps}$ exakt mit der experimentell bestimmten Schallgeschwindigkeit, $v_2^{TW} = v_S$, ausbreitet. Nach Carter entspricht dies dem charakteristischen Verhalten einer Schockwelle [224]. Die bei hoher elektronischer Energiedeponierung über die gesamte amorphe Probenoberfläche induzierte homogene Formierung von Hohlräumen kann, basierend auf den Ergebnissen der MD-Simulation, auf einen Schock-Wellen-Mechanismus zurückgeführt werden [208]. Der materialspezifische Schwellwert $\varepsilon_e^{HRF} = (10.5 \pm 1.0) \text{ keV nm}^{-1}$ wird daher als erforderliche Energiedeponierung für die Bildung einer sich radial um die Ionenspur ausbreitenden Druckwelle mit $v > v_S$ aufgefasst. Das Material um die Ionenspur verhält sich für $\varepsilon_e > \varepsilon_e^{HRF}$ nicht mehr elastisch, so dass lokal dauerhafte Strukturmodifikationen in Form von Hohlräumen (siehe Abb. 4.38) entstehen.

5.2 Ionenstrahlinduzierte anisotrope plastische Deformation

5.2.1 Elektronische Energiedeponierung (SHI-Bestrahlung)

5.2.1.1 Beschreibung der Oberflächenverschiebung

Die in a-Ge bei winkelabhängiger SHI-Bestrahlung beobachtete anisotrope plastische Deformation mit positiver Deformationsausbeute A_0 [205] ist mit dem bei Bestrahlung von konventionellen Gläsern [17, 25–27, 33] und a-Si [36, 38] beobachteten Verhalten vergleichbar. Ein im Zentralbereich der Proben erwarteter stationärer plastischer Fließprozess bzw. eine linear mit der Fluenz ansteigende Oberflächenverschiebung Δx wurde jedoch nicht beobachtet (siehe Abb. 4.39). Die Quantifizierung der Deformationsausbeute A_0 basierend auf der aus dem modifizierten Maxwell-Modell (siehe Kap. 2.2.2.4, Abschnitt C) abgeleiteten Gleichung 2.26 ist daher nicht möglich. Die im Maxwell-Modell postulierte Konstanz des Volumens bzw. der Dichte der sich deformierenden amorphen Schicht ist in SHI-bestrahltem a-Ge infolge der effektiven, bereits bei niedrigen Fluenzen auftretenden Hohlraumformierung nicht gewährleistet. Der homogene stationäre Fließprozess (Gl. 2.26) ist demnach mit einem sich stetig erhöhenden Fließprozess $\Delta x \propto \Delta z(N_I)N_I$ überlagert, der auf die kontinuierliche ionenstrahlinduzierte vertikale Ausdehnung Δz der amorphen Oberflächenschicht zurückzuführen ist. Unter Berücksichtigung der Ergebnisse zur ionenstrahlinduzierten Volumenausdehnung, für die ein linearer Zusammenhang mit der Ionenfluenz nachgewiesen wurde (siehe Abb. 4.30 und Gl. 4.3), wird die folgende fluenzabhängige Relation für die Beschreibung der in dieser Arbeit ermittelten Oberflächenverschiebung abgeleitet [205]:

$$\Delta x(z=0) = 3d_{am} \sin(2\Theta) A_0(\varepsilon_e) N_I + \Omega(\xi) N_I^2. \quad (5.3)$$

Die exzellente Übereinstimmung der Regression mit den experimentell bestimmten Daten der Oberflächenverschiebung (vgl. Abb. 4.39, durchgezogene und gestrichelte Linien) bestätigt, dass das fluenzabhängige Verhalten der Oberflächenverschiebung durch einen linearen ($\Delta x \propto N_I$) und einen quadratischen Term ($\Delta x \propto N_I^2$) beschrieben werden kann. Eine quantitative Beschreibung des von der Volumenausdehnung ξ abhängigen freien Fitparameters Ω ist nicht möglich. Es wird jedoch vermutet, dass die kontinuierliche Modifikation der homogenen amorphen Schicht in eine nanoporöse Schicht eine stetige Vergrößerung der effektiven Deformationsausbeute, $\Delta x \propto A_{eff} N_I$ mit $A_{eff} \propto A_0[1 + \Omega(\xi)N_I]$, bewirkt. Der in einigen SHI-bestrahlten amorphen Materialien im Bereich $N_{I_0} \approx 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ zu erwartende Fluenzschwellwert [25, 26, 143, 225], unterhalb dem keine plastische Deformation nachweisbar ist (vgl. Kap. 2.2.2.4, Ab-

Tab. 5.2: Die aus den Experimenten zur anisotropen plastischen Deformation bei Raumtemperatur mittels Gleichung 5.3 berechneten Werte der Deformationsausbeute pro Ion A_0 von a-Ge für verschiedene Bestrahlungsbedingungen (Energie E , Einfallswinkel Θ und die über die amorphe Schicht d_{am} gemittelte elektronische Energiedeposition $\bar{\varepsilon}_e$).

E (MeV)	Ion	Θ (°)	$\bar{\varepsilon}_e$ (keV nm ⁻¹)	A_0 (10 ⁻² nm ²)
89	Au	45	18.1	29.0 ± 2.9
185	Au	45	28.3	77.3 ± 3.0
185	Au	60	38.6	137.1 ± 7.9

schnitt A), konnte für a-Ge aufgrund der hohen Bestrahlungsfluenzen im Bereich von $N_I = (10^{13} \dots 10^{14}) \text{ cm}^{-2}$ jedoch nicht nachgewiesen werden [205].

5.2.1.2 Charakterisierung der Deformationsausbeute

Wenn beide Terme in Gleichung 5.3 unabhängig voneinander agieren, wird der Einfluss der Hohlraumformierung auf den plastischen Fließprozess durch den zusätzlichen additiven quadratischen Term funktionell beschrieben, während der lineare Term ausschließlich dem konventionellen, bei konstantem Volumen induzierten plastischen Fließprozess entspricht [205]. Unter diesen Annahmen kann eine Quantifizierung der Deformationsausbeute A_0 mittels Gleichung 5.3 erfolgen. Die basierend auf der Regression mit Gleichung 5.3 (vgl. Abb. 4.39) ermittelten Werte von A_0 sind in Tabelle 5.2 aufgelistet und in Abbildung 5.5 als Funktion der elektronischen Energiedeposition ε_e aufgetragen. Die Deformationsausbeute A_0 steigt mit zunehmender elektronischer Energiedeposition linear an, wobei für die Raumtemperaturbestrahlungen der Anstieg $\beta(RT) = \partial A_0 / \partial \varepsilon_e = (5.0 \pm 0.4) \times 10^{-2} \text{ nm}^3 \text{ keV}^{-1}$ beträgt. Durch Extrapolation der linearen Regression auf $A_0 = 0$ wird zudem erstmals ein materialspezifischer Schwellwert

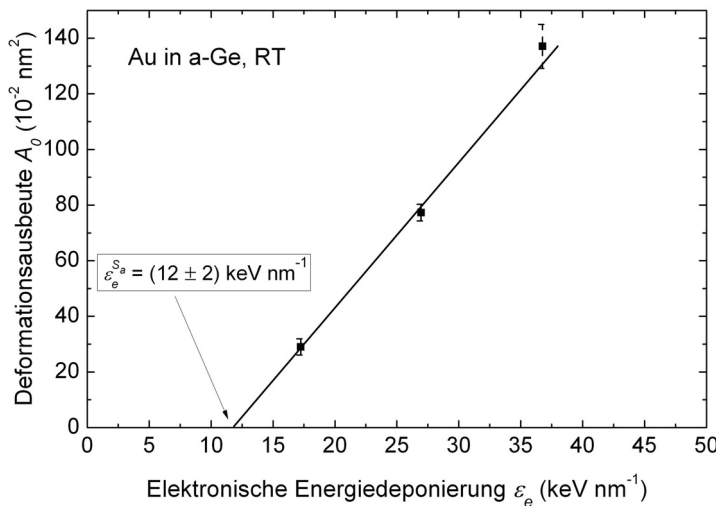


Abb. 5.5: Die aus dem linearen Term von Gleichung 5.3 für a-Ge berechnete Deformationsausbeute pro Ion A_0 als Funktion der elektronischen Energiedeposition ε_e . Durch Extrapolation der linearen Regression wird für die ionenstrahl-induzierte plastische Deformation ein Schwellwert der Energiedeposition $\varepsilon_e^{S_a}$ nachgewiesen [205].

$\varepsilon_e^{S_a}$ für die ionenstrahlinduzierte plastische Deformation in a-Ge nachgewiesen [205]:

$$A_0(\varepsilon_e, T) = \beta(RT)[\varepsilon_e - \varepsilon_e^{S_a}] \quad \text{mit} \quad \varepsilon_e^{S_a} = (12 \pm 2) \text{ keV nm}^{-1}. \quad (5.4)$$

Die Abhängigkeit der für a-Ge ermittelten Deformationsausbeute von der elektronischen Energiedeposition zeigt somit alle charakteristischen Eigenschaften des in Kapitel 2.2.2.4 beschriebenen plastischen Deformationsprozesses (vgl. Gl. 2.17). Der für die plastische Deformation in a-Ge extrahierte Schwellwert ist vergleichbar mit dem in a-Si ermittelten temperaturunabhängigen Schwellwert $\varepsilon_e^{S_a} = (14.2 \pm 0.5) \text{ keV nm}^{-1}$ [36, 38]. Der Vergleich mit den in konventionellen Gläsern berichteten Schwellwerten für SiO_2 ($\varepsilon_e^{S_a} = 2.5 \text{ keV nm}^{-1}$) [226], $\text{Fe}_{85}\text{B}_{15}$ ($\varepsilon_e^{S_a} = 13 \text{ keV nm}^{-1}$) [143, 227] und $\text{Pd}_{80}\text{Si}_{20}$ ($\varepsilon_e^{S_a} = 23 \text{ keV nm}^{-1}$) [226] zeigt ebenfalls, dass sich für a-Ge der basierend auf Gleichung 5.3 abgeschätzte Schwellwert $\varepsilon_e^{S_a}$ in derselben Größenordnung befindet [205].

5.2.1.3 Interpretation der positiven Deformationsausbeute

Trotz der nicht auf einem theoretischen Modell beruhenden analytischen Beschreibung des bedingt durch die Hohlraumformierung erhöhten plastischen Fließprozesses zeigen die experimentellen Ergebnisse der SHI-Bestrahlung von a-Ge alle Charakteristika des Ionenstrahlhämmerns (vgl. Kap. 2.2.2.4). Der Schwellwert für die ionenstrahlinduzierte plastische Deformation $\varepsilon_e^{S_a}$ kann entsprechend der theoretischen Beschreibung durch das Trinkaus-Modell [41–45] als erforderliche Energiedeposition für die Bildung von heißen niederviskosen flüssigen Zonen um die Ionenbahn interpretiert werden. Der Prozess des Energietransfers vom Elektronen- zum atomaren System, der zu diesen thermischen Inklusionen führt, kann in a-Ge auf den Mechanismus des nichtthermischen Schmelzens oder der Elektronen-Phononen-Kopplung zurückgeführt werden, da in Halbleitern nur schwach ausgeprägte Ionenspurpotentiale vorliegen [228], die keine effektive Coulomb-Explosion induzieren können. Aufgrund des unterdrückten Kristallisationsprozesses durch die rapide, innerhalb von (10...100) ps abgeschlossene Abkühlung der niederviskosen Zone, frieren die durch atomare Umordnung induzierten lokalen Deformationen permanent ein (vgl. Abb. 2.7). In a-Si wurde dieser Phasenübergang von einer in der niederviskosen Zone kurzzeitig existierenden, unterkühlten metallischen flüssigen Si-Phase (HDL-Si) zur festen, niederdichten amorphen Si-Phase (LDA-Si) systematisch von Hedler et al. untersucht [36, 38]. Die beobachteten makroskopischen Deformationen mit $A_0 > 0$ können hierbei nur durch einen zweistufigen Prozess erklärt werden [36, 38]. Der bisher postulierte Flüssig-Fest-Phasenübergang 1. Art [229] sollte aufgrund der strukturellen Dichteunterschiede zwischen flüssiger HDL- und fester LDA-Phase ($\rho_{\text{HDL-Si}}/\rho_{\text{LDA-Si}} > 1$) zu einer über einen großen Temperaturbereich negativen Eigendehnung $\epsilon^*(T) < 0$ führen und damit gemäß der Trinkaus-Theorie

[41–45] eine Deformation mit entgegengesetztem Vorzeichen $A_0 < 0$ aufweisen. Unter der Annahme eines Flüssig-Flüssig-Phasenübergangs von der HDL-Phase zu einer niederdichten flüssigen Si-Phase (LDL-Si), die über einen Glasübergang zur LDA-Si-Phase erstarrt, wurden die experimentellen Ergebnisse in Si im Rahmen der Trinkaus-Theorie erfolgreich beschrieben [36, 38]. Die Existenz einer sich thermisch ausdehnenden, der LDA-Phase strukturell ähnlichen LDL-Phase führt in der niederviskosen Zone zu einer effektiven Eigendehnung $\epsilon^*(T) > 0$, so dass, analog zu konventionellen Gläsern, im mechanischen Gleichgewicht an der Erstarrungsfront der flüssigen Zone Deformationen mit $A_0 > 0$ eingefroren werden. Aus dem experimentell ermittelten Vorzeichen der anisotropen plastischen Deformation ($A_0 > 0$) kann somit direkt auf die Existenz einer LDL-Phase bzw. eines Flüssig-Flüssig-Phasenübergangs geschlossen werden.

Für Ge, dessen halbleitende tetraedrische amorphe Phase sich ebenso wie bei Si strukturell stark von der metallischen hochkoordinierten flüssigen Phase unterscheidet ($\rho_{HDL-Ge}/\rho_{LDA-Ge} > 1$), wurde im Rahmen der in dieser Arbeit erzielten Ergebnisse eine quantitativ identische ionenstrahlinduzierte plastische Deformation nachgewiesen. Aus dem plastischen Fließen der a-Ge-Oberflächenschicht auf dem inerten c-Ge-Substrat in Richtung der Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche mit $A_0 > 0$ kann unmittelbar auf die Existenz einer flüssigen LDL-Phase geschlossen werden, die über einen Glasübergang an den Randbereichen der niederviskosen Zone zur stabilen HDA-Ge-Phase erstarrt [205]. Der in Si und Ge nachgewiesene Polymorphismus der flüssigen Phase (HDL und LDL) deutet somit auf einen generellen Effekt in allen kovalent, tetragonal gebundenen Materialsystemen hin.

5.2.2 Nukleare Energiedeposition (LEI-Bestrahlung)

Die Ergebnisse der niederenergetischen Ionenbestrahlung unter schrägem Ioneneinfall haben gezeigt, dass sich die in a-Ge induzierten porösen Schichten makroskopisch ähnlich wie die bei schräger SHI-Bestrahlung induzierten porösen Schichten verhalten. Unabhängig von der Ionenenergie weist die in Richtung der Projektion des Ionenstrahls definierte Ausrichtung der porösen Strukturen (vgl. Abb. 4.14b mit Abb. 4.40) auf einen ionenstrahlinduzierten plastischen Fließprozess mit positivem Vorzeichen hin. Dieser direkte Hinweis auf eine plastische Deformation bei niederenergetischer Ionenbestrahlung soll im Folgenden quantitativ diskutiert werden [196].

5.2.2.1 Ionenstrahlinduzierte Deformation am Randbereich: Formierung einer Wallstruktur

Eine fluenzabhängige Quantifizierung der Oberflächenverschiebung Δx durch die bei SHI-Bestrahlung erfolgreich angewendete Methode der Oberflächenstrukturierung mit-

tels Goldquadraten (siehe Kap. 3.1) ist bei LEI-Bestrahlung aufgrund der kontinuierlichen Abtragung der dünnen Au-Schicht infolge Sputtererosion ($r_s(\varepsilon_n) \approx (10 \dots 15)$ Au-Atome pro Ion, SRIM2008 [66, 67]) sowie durch die unabhängig von den chemischen Materialeigenschaften immer stattfindende ballistische Grenzflächendurchmischung [230–233] nicht möglich. Die im Zentralbereich der Probe homogene stationäre Schergeschwindigkeit $v_x > 0$ kann somit nicht näher bestimmt werden, muss aber am Rand des bestrahlten Bereichs durch die laterale Begrenzung bestrahlt-unbestrahlt infolge einer sukzessiven Reduzierung des plastischen Fließprozesses verschwinden $v_x(x = x_{G,W}) = 0$. Das kontinuierliche plastische Fließen von Materie im Zentralbereich führt zu einem stetigen Materialtransport in Richtung der Projektion des Ionenstrahls und induziert an den Randbereichen eine vertikale Deformationsgeschwindigkeit v_z , die eine permanente Änderung der Probengeometrie entsprechend der schematischen Darstellung in Abbildung 5.6 bewirkt. Als unmittelbare Folge ist an den Randbereichen die Formierung einer Graben- ($x = x_G$) und Wallstruktur ($x = x_W$) zu beobachten, da bei der plastischen Deformation nach Trinkaus das Volumen bzw. die Dichte des Materials konstant bleibt und die Ionenbestrahlung zu keinem substantiellen Materialverlust führt [41–45].

Eine derartige Strukturmodifikation wurde bereits für SHI-Bestrahlungen an verschiedenen amorphen Materialien als direkte Konsequenz des plastischen Fließprozesses, d.h. infolge lateralen Materialtransports in Richtung der Projektion des Ionenstrahls auf die Probenoberfläche, nachgewiesen [33, 38]. Nach der Theorie von Trinkaus folgt aus der Integration der stationären, aber tiefenabhängigen plastischen Verschiebung im Zentralbereich $\Delta x(z)$ über die gesamte Deformationstiefe d_d folgende Beziehung für das im Zentralbereich lateral fließende Material F_Z [33, 38]:

$$F_Z = \int_{d_d}^0 \Delta x(z) dz = 3 \sin(2\Theta) N_I \int_{d_d}^0 A_0(\epsilon_e(z)) (z + d_d) dz. \quad (5.5)$$

Unter der Annahme von dünnen amorphen Schichten ($d_d = d_{am}$), bei denen die plastische Deformation durch eine konstante Deformationsausbeute $A_0(\epsilon_e)$ beschrieben wer-

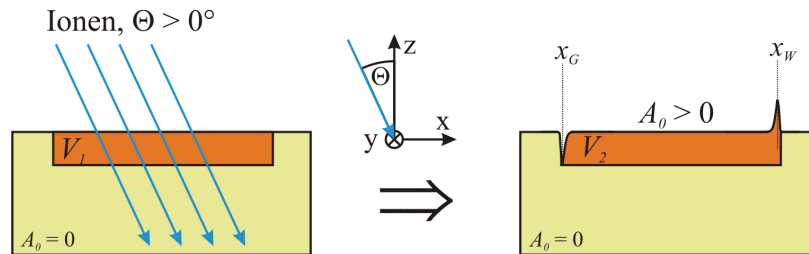


Abb. 5.6: Die Ionenbestrahlung einer amorphen Oberflächenschicht ($A_0 > 0$) auf einem dicken inerten Substrat ($A_0 = 0$) unter einem Winkel $\Theta > 0^\circ$ führt an den lateralen Randbereichen infolge sukzessiv reduziertem plastischen Fließprozess ($v_x(x = x_{G,W}) = 0$) zur Formierung einer Graben- (x_G) und Wallstruktur (x_W) bei konstantem Volumen ($V_1 = V_2$).

den kann, vereinfacht sich Gleichung 5.5 zu

$$F_Z = \int_{d_d}^0 \Delta x(z) dz = \frac{3}{2} A_0(\epsilon_e) d_d^2 \sin(2\Theta) N_I = \frac{d_{am}}{2} \Delta x(z=0) \stackrel{!}{=} F_W = F_G. \quad (5.6)$$

Unter der Annahme der Volumenkonstanz entspricht F_Z dem am Randbereich fehlenden bzw. aufgestauten Material, d.h. der Grabenstruktur F_G bzw. Wallstruktur F_W . Winkelabhängige SHI-Bestrahlungen von dünnen amorphen Schichten zeigen eine gute Übereinstimmung der experimentell abgeschätzten Werte $F_Z = F_G = F_W$ [33, 38].

Im Rahmen dieser Arbeit wurde auch bei schräger LEI-Bestrahlung von Ge-Proben, bei denen keine hohlrauminduzierte vertikale Volumenexpansion stattfindet, eine von der Fluenz abhängige wallartige Modifikation der Probenoberfläche am Randbereich $x = 0$ beobachtet (siehe Abb. 4.20) [196]. Der experimentelle Nachweis der Bildung einer Grabenstruktur war aus Gründen der Bestrahlungsgeometrie nicht möglich. Im Gegensatz zu den SHI-Bestrahlungen (vgl. Gl. 5.6) ist für die LEI-Bestrahlungen der über den deformierenden Bereich variierende elektronische Energieeintrag $A_0(\epsilon_e(z))$ bei der Integration der Gleichung 5.5 zu berücksichtigen. Zudem ist keine konstante, sich deformierende amorphe Schicht d_d definiert, so dass der Wert von $d_d \leq R_p$ nur grob abgeschätzt werden kann. Darüber hinaus ist die elektronische Energiedeposition gemäß der Ergebnisse in Kapitel 5.2.1 viel zu gering ($\epsilon_e < \epsilon_e^{S_a}$), um nach der Trinkaus-Theorie niederviskose Inklusionen in der a-Ge-Phase zu erzeugen [196, 205].

Systematische Experimente an a-Si mit elektronischen Energieeinträgen $\epsilon_e < \epsilon_e^{S_a}$ haben gezeigt, dass auch unterschwellige Bestrahlungen in einer effektiven ionenstrahlinduzierten Deformation der amorphen Schichten mit sehr kleinen Deformationsausbeuten resultieren [145, 234]. Nach Dillen et al. können die bei niederenergetischer Bestrahlung beobachteten geringen plastischen Deformationen in der amorphen Phase auf lokale Spannungen infolge thermisch induzierter Eigendehnung zurückgeführt werden, die über einen defektinduzierten Fließprozess innerhalb der kondensierten amorphen Phase relaxieren und kontinuierlich abgebaut werden [145]. Darüber hinaus kann der im niederen und mittleren Energiebereich dominierende nukleare Energieeintrag ebenfalls durch einen defektinduzierten Mechanismus zu einem Fließprozess beitragen. Wie die Experimente von Hayes et al. bzw. die MD-Simulationen von Nordlund et al. nahelegen (siehe Kap. 2.3.2.1), können alle Ge-Atome in einer durch ein einzelnes Ion ausgelösten Stoßkaskade eine kinetische Energie oberhalb der Schmelzenergie erhalten und damit lokal eine temporäre, niederviskose, quasi-flüssige Phase induzieren [96, 97, 171], in der analog der Trinkaus-Theorie eine Relaxation von thermisch induzierten Spannungen über viskoses Fließen erfolgt [41–45]. Folglich tragen sowohl der nukleare als auch der elektronische Energieeintrag wesentlich zum ionenstrahlinduzierten Fließprozess in a-Ge bei. Unter der Annahme, dass auch bei LEI-Tiefteperaturbestrahlungen der plas-

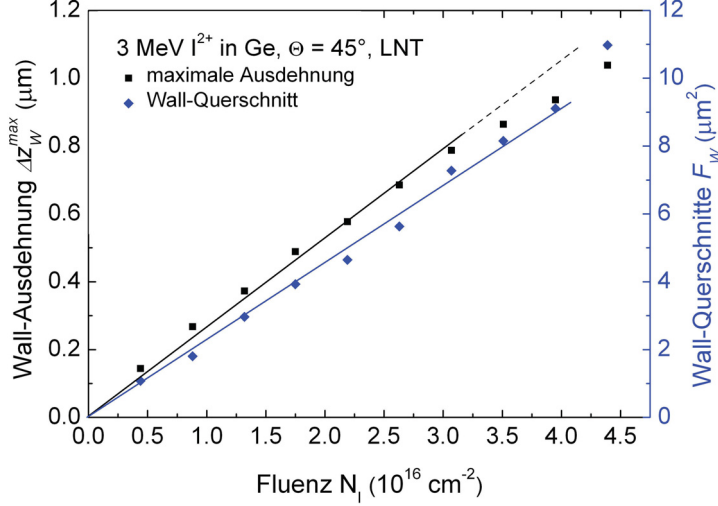


Abb. 5.7: Aus Oberflächenprofilometrie (siehe Abb. 4.20) ermittelter Wall-Querschnitt F_W und maximale Wall-Ausdehnung Δz_W^{max} als Funktion der Fluenz N_I für die Bestrahlung von a-Ge mit 3 MeV I²⁺-Ionen unter $\Theta = 45^\circ$ und LNT. Im dargestellten Fluenzbereich wurde unter den gegebenen Bestrahlungsbedingungen keine Hohlraumformierung nachgewiesen [196].

tische Fließprozess über den gesamten bestrahlten Probenbereich ohne substantiellen Materialverlust und Änderung der Dichte erfolgt, sollten die in Tabelle 4.2 aufgelisteten, experimentell ermittelten Wall-Querschnitte F_W mit dem im Zentralbereich lateral fließenden Material F_Z kongruent sein. Unabhängig von der funktionellen Beschreibung der tiefenabhängigen Deformationsausbeute $A_0(\epsilon_n(z), \epsilon_e(z))$ lässt sich für den Wall-Querschnitt F_W folgender linearer Zusammenhang mit der Fluenz ableiten [196]:

$$F_Z = \int_{d_d}^0 \Delta x(z) dz = 3 \sin(2\Theta) N_I \int_{d_d}^0 A_0(\epsilon_n(z), \epsilon_e(z)) (z + d_d) dz = \lambda N_I \stackrel{!}{=} F_W. \quad (5.7)$$

Durch die fluenzabhängige Darstellung der experimentell ermittelten Werte des Wallquerschnitts F_W und der maximalen vertikalen Wall-Ausdehnung Δz_W^{max} in Abbildung 5.7 wird das in Gleichung 5.7 beschriebene lineare Anwachsen von F_W und Δz_W^{max} mit steigender Fluenz nachgewiesen [196]. Es wird deutlich, dass sich a-Ge bei niederenergetischer Bestrahlung in gleicher Weise wie konventionelles Glas [33] bzw. a-Si [38] verhält. Zudem deutet die Extrapolation der Regressionsgeraden auf eine vernachlässigbar kleine Inkubationsfluenz N_{I_0} für den Beginn des ionenstrahlinduzierten lateralen Materialtransports unter den gegebenen Bestrahlungsbedingungen hin [196]. Der Vergleich mit der Amorphisierungsfluenz N_I^{am} (vgl. Kap. 4.1.1.1) zeigt, dass $N_I^{am} \approx N_{I_0} < 5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ und somit die plastische Deformation, d.h. der laterale Materialtransport, unmittelbar nach der Formierung einer ausgedehnten amorphen Oberflächenschicht beginnt.

Für Fluenzbereiche, bei denen im Zentralbereich infolge einsetzender Hohlraumformierung eine extreme vertikale Volumenexpansion beginnt, konnte sowohl für RT- als auch für LNT-Experimente keine quantitative Auswertung der Wallstruktur erfolgen, da sich beide Prozesse überlagern. Die Bildung von Hohlräumen in der a-Ge-Schicht resultiert zudem in einem superlinearen Anstieg von F_W , woraus analog den Ergebnissen

der SHI-Bestrahlung auch für die niederenergetische Bestrahlung ein erhöhter plastischer Fließprozess infolge der Hohlraumformierung angenommen werden kann [196].

5.2.2.2 Interpretation der winkelabhängigen Strukturmodifikation an der Probenoberfläche

Die im Rahmen dieser Arbeit erstmalig beobachtete Ionenstrahlinduzierte Oberflächenmodifikation bei schräger LEI-Bestrahlung mit Energien im Bereich $E = (3 \dots 9)$ MeV unterscheidet sich wesentlich von der bei nahezu senkrechter LEI-Bestrahlung [196].

Da für niederenergetische Bestrahlung unter einem Einfallswinkel $\Theta \approx 0^\circ$ die Schergeschwindigkeit v_x im Zentralbereich verschwindet, d.h. es gilt $v_x = 0$, und die Bestrahlung effektiv keinen lateralen Materialtransport bewirkt, wird keine nachweisbare plastische Deformation (z.B. Wallstruktur) an den Randbereichen der senkrecht bestrahlten Proben beobachtet. Vielmehr zeigt sich unabhängig von der Ionenart, der Bestrahlungstemperatur und der Bildung von porösen Schichten die Formierung einer homogenen Makrostruktur (MS) bei hohen, nahezu identischen Fluenzen im Bereich von $N_I^{MS} = (5 \dots 6) \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ an der Probenoberfläche (vgl. Abb. 4.13). Die lateral mehrere Mikrometer betragende Ausdehnung dieser Struktur, die sowohl in porösen als auch homogenen amorphen Schichten entsteht, weist auf einen spannungsinduzierten Formierungsprozess durch den anisotropen plastischen Ionen-Hämmerungseffekt (siehe Kap. 2.2.2.4) innerhalb der bestrahlten Oberflächenschicht hin [196].

Die nichtsättigende plastische Deformation einer dünnen amorphen Schicht auf einem inerten Substrat, d.h. die kontinuierliche laterale Ausdehnung der bestrahlten amorphen Oberflächenschicht senkrecht zum Ionenstrahl (Ionen-Hämmerungseffekt, vgl. Abb. 2.3) bewirkt den Aufbau von planaren Spannungen, die in freitragenden Proben zu einer Biegung ähnlich der schematischen Darstellung in Abbildung 2.5 führt [235–238]. Wird der Hämmerungseffekt zusätzlich mechanisch durch ein lateral umgebendes, ungeschädigtes inertes Material eingeschränkt, steigen die in der bestrahlten Schicht induzierten Spannungen, die nicht vollständig durch Ionenstrahlinduzierte Spannungsrelaxation über viskoses Fließen abgebaut werden, stetig an. Diese induzierten Spannungen werden bei schräger LEI-Bestrahlung kontinuierlich bereits bei kleinen Fluenzen durch einen plastischen Fließprozess, der an den Randbereichen zur Formierung einer Graben- und Wall-Struktur führt, abgebaut. Bei senkrechter LEI-Bestrahlung hingegen bewirkt die Bildung einer Makrostruktur eine effektive Relaxation der induzierten planaren Spannungen, wenn diese bei der Schwellwertfluenz N_I^{MS} einen kritischen materialspezifischen Grenzwert, bis zu dem sich das amorphe Material elastisch verhalten würde, übersteigen [196].

Kapitel 6

Zusammenfassung

Gegenstand der vorliegenden Arbeit war die systematische Untersuchung ionenstrahl-induzierter Strukturmodifikationen in amorphen Germaniumschichten (a-Ge) infolge nieder- (LEI, [196, 203]) und hochenergetischer (SHI, [205, 206]) Ionenbestrahlung.

Die LEI-Bestrahlung von kristallinem Ge (c-Ge) bewirkt aufgrund der dominierenden nuklearen Streuung der Ionen an den Festkörperatomen die Formierung einer homogenen a-Ge-Schicht. Direkt an der Oberfläche wurde für Fluenzen zwei Größenordnungen oberhalb der Amorphisierungsfluenz die Bildung von stabilen Hohlräumen unabhängig von den Bestrahlungsbedingungen beobachtet. Erstmals wurde für die ionenstrahlinduzierte Hohlraumformierung bzw. für die stetige Ausdehnung der sich mit wachsender Fluenz bildenden porösen Schicht eine lineare Abhängigkeit von der in nukleare Prozesse deponierten Energie ε_n nachgewiesen. Während im Inneren des Festkörpers die Rekombination der durch elastische Stöße induzierten Frenkel-Defekte dominiert, können die Ge-Interstitials verstärkt an der defektreichen Probenoberfläche rekombinieren. Der Prozess der oberflächennahen Hohlraumformierung wird daher auf die Diffusion und die energetisch bedingte Agglomeration der verbleibenden Vakanzen zurückgeführt. Weiterhin wurde entgegen bisheriger experimenteller Ergebnisse die Bildung von vergrabenen Hohlräumen beobachtet, die eine Abhängigkeit von der Ionenart zeigt. Eine hohe Konzentration an implantierten Ionen, die nicht substitutionell infolge der Rekombination mit Vakanzen in die auf kovalenten Bindungen beruhende a-Ge-Matrix eingebaut werden, führt zu einer Vielzahl von interstitiellen Fremdatomen, an denen die infolge nuklearer Prozesse induzierten Vakanzen zunehmend agglomerieren. Dieser Prozess, der die Hohlraumformierung erst bei hohen Implantationsfluenzen dominiert, führt in der Tiefe der projizierten Ionenreichweite zur Bildung vergrabener Hohlräume bzw. poröser Schichten sowie für lokal sehr hohe Fremdatomkonzentrationen zur Formierung netzwerkartiger hochporöser Schichten. Im Gegensatz zur LEI-Bestrahlung dominiert bei der SHI-Bestrahlung im oberflächennahen Bereich ausschließlich der hohe elektronische Energieeintrag ($\varepsilon_e \gg \varepsilon_n$). Während in den c-Ge-Proben im Bereich der hohen elektronischen Energiedeponierung keine Strah-

lendifekte, Hohlräume oder plastischen Deformationen nachgewiesen wurden, führt der hohe elektronische Energieeintrag in den $3.1 \mu\text{m}$ dicken voramorphisierten a-Ge-Oberflächenschichten zur Bildung von zufällig verteilten Hohlräumen. Basierend auf dem für unterschiedliche Energieeinträge ermittelten linearen Zusammenhang zwischen hohlrauminduzierter vertikaler Volumenausdehnung und der Fluenz wurde erstmalig ein materialspezifischer Schwellwert von $\varepsilon_e^{HRF} = (10.5 \pm 1.0) \text{ keV nm}^{-1}$ ermittelt, oberhalb dessen die ionenstrahlinduzierte Hohlraumformierung in a-Ge einsetzt. Die darüber hinaus bei hohen Fluenzen beobachtete Formierung von vergrabenen Hohlräumen im c-Ge-Substrat ist auf die durch ε_n induzierte Tiefenamorphisierung im Bereich $z \approx (9 \dots 16) \mu\text{m}$ zurückzuführen. Die in dieser vergrabenen amorphen Schicht infolge elektronischer Energiedeposition induzierte Bildung von Hohlräumen beginnt in Tiefen z , in denen der elektronische Energieeintrag $\varepsilon_e(z)$ den Schwellwert ε_e^{HRF} überschreitet ($\varepsilon_e(z) > \varepsilon_e^{HRF}$). MD-Simulationen bestätigen alle experimentell ermittelten Ergebnisse und zeigen, dass die infolge hoher elektronischer Energiedeposition beobachtete Hohlraumformierung auf einem Schockwellen-Mechanismus basiert [208].

Die bei schräger SHI-Bestrahlung der Hohlraumformierung überlagerte anisotrope plastische Deformation der a-Ge-Schicht wurde durch eine aus dem viskoelastischen Maxwell-Modell abgeleiteten, aber unter Berücksichtigung der experimentellen Ergebnisse zur Hohlraumformierung modifizierten Gleichung sehr gut beschrieben. Die dabei ermittelten positiven Deformationsausbeuten weisen oberhalb eines erstmals für a-Ge extrahierten Schwellwertes für die ionenstrahlinduzierte plastische Deformation $\varepsilon_e^{S_a} = (12 \pm 2) \text{ keV nm}^{-1}$ das charakteristische lineare Verhalten des Ionen-Hämmerungseffekts auf. Ebenso wie in a-Si können die Ergebnisse zur plastischen Deformation in a-Ge nur durch einen Polymorphismus der unterkühlten flüssigen Ge-Phase erklärt werden. Der in SHI-bestrahlten a-Ge-Schichten zum plastischen Fließen führende Ionen-Hämmerungseffekt spiegelt sich zudem direkt in der Orientierung der erzeugten porösen Strukturen wider. Somit kann die definierte Ausrichtung der bei schräger LEI-Bestrahlung induzierten porösen Schicht ebenfalls als unmittelbare Folge eines plastischen Fließprozesses interpretiert werden. Zur Untersuchung des Fließprozesses bei schräger LEI-Bestrahlung wurde die sich mit zunehmender Fluenz am Randbereich bestrahlt-unbestrahlt bildende Wallstruktur, die bisher ausschließlich bei SHI-Bestrahlung beobachtet wurde, analysiert. Der dabei experimentell nachgewiesene lineare Anstieg des Wallquerschnitts mit zunehmender Fluenz kann qualitativ im Rahmen des Maxwell-Modells als Folge eines lateralen ionenstrahlinduzierten Materialtransports erklärt werden. Bei senkrechter LEI-Bestrahlung resultiert der nichtsättigende Ionen-Hämmerungseffekt in stetig ansteigenden planaren Spannungen, die nicht vollständig über viskoses Fließen kompensiert werden können, so dass eine effektive Relaxation ausschließlich durch die Bildung einer Makrostruktur erfolgt.

Literaturverzeichnis

- [1] H. Ryssel and I. Ruge. *Ionenimplantation*. Akad. Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1978.
- [2] G. Götz and K. Gärtner. *High Ion Beam Analysis of Solids*. Akademie-Verlag Berlin, 1988.
- [3] M. Nastasi, J.W. Mayer, and J.K. Hirvonen. *Ion-Solid Interactions: Fundamentals, Applications*. Cambridge University Press, 1996.
- [4] F. Frost and B. Rauschenbach. *Appl. Phys. A*, 77 (1):1 – 9, 2003.
- [5] H. Hartung, E-B. Kley, A. Tünnermann, Th. Gischkat, F. Schrempel, and W. Wesch. *Opt. Lett.*, 33 (20):2320 – 2322, 2008.
- [6] F. Schrempel, Th. Gischkat, H. Hartung, Th. Höche, E-B. Kley, A. Tünnermann, and W. Wesch. *Opt. Lett.*, 34 (9):1426 – 1428, 2009.
- [7] A. ul. Haq and O. Meyer. *J. Low Temp. Phys.*, 49 (1 - 2):151 – 165, 1982.
- [8] C. Hammerl and B. Rauschenbach. *Nucl. Instr. Meth. B*, 178 (1 - 4):220 – 223, 2001.
- [9] K. Tsukamoto, S. Komori, T. Kuroi, and Y. Akasaka. *Nucl. Instr. Meth. B*, 59 - 60 (1):584 – 591, 1991.
- [10] A. Grob, P. Rohr, G. Mariani, J. Sevely, and J.J. Grob. *Nucl. Instr. Meth. B*, 112 (1 - 4):169 – 172, 1996.
- [11] R.A. Yankov, J.R. Kaschny, P.F.P. Fichtner, A. Mücklich, U. Kreißig, and W. Skorupa. *Microelectronic Engineering*, 36 (1 - 4):129 – 132, 1997.
- [12] N.W. Cheung, C.L. Liang, B.K. Liew, R.H. Mutikainen, and H. Wong. *Nucl. Instr. Meth. B*, 37 - 38:941 – 950, 1989.
- [13] W. Wesch, A. Heft, R. Menzel, T. Bachmann, G. Peiter, H. Hobert, T. Höche, P. Dannberg, and A. Bräuer. *Nucl. Instr. Meth. B*, 148 (1 - 4):545 – 550, 1999.
- [14] M.C. Ridgway, C. Jagadish, R.G. Elliman, and N. Hauser. *Appl. Phys. Lett.*, 60 (24):3010 – 3012, 1992.
- [15] S. Charbonneau, P.J. Poole, Y. Feng, G.C. Aers, M. Dion, M. Davies, R.D. Goldberg, and I.V. Mitchell. *Appl. Phys. Lett.*, 67 (20):2954 – 2956, 1995.
- [16] http://www.helmholtz-berlin.de/angebote/pt/en/index_de.html.
- [17] A. Gutzmann, S. Klaumünzer, and P. Meier. *Phys. Rev. Lett.*, 74 (12):2256 – 2259, 1995.
- [18] T. van Dillen, E. van der Giessen, P.R. Onck, and A. Polman. *Phys. Rev. B*, 74 (13):132103, 2006.
- [19] G. Szenes. *Phys. Rev. B*, 51 (13):8026 – 8029, 1995.

- [20] M. Toulemonde, J.M. Costantini, Ch. Dufour, A. Meftah, E. Paumier, and F. Studer. *Nucl. Instr. Meth. B*, 116 (1 - 4):37 – 42, 1996.
- [21] S. Klaumünzer. *Nucl. Instr. Meth. B*, 225:136 – 153, 2004.
- [22] W. Wesch, A. Kamarou, and E. Wendler. *Nucl. Instr. Meth. B*, 225 (1 - 2):111 – 128, 2004.
- [23] W. Wesch, A. Kamarou, E. Wendler, and S. Klaumünzer. *Nucl. Instr. Meth. B*, 242 (1 - 2):363 – 366, 2006.
- [24] A. Kamarou, W. Wesch, E. Wendler, A. Undisz, and M. Rettenmayr. *Phys. Rev. B*, 78 (5):054111, 2008.
- [25] S. Klaumünzer and G. Schumacher. *Phys. Rev. Lett.*, 51 (21):1897 – 1990, 1983.
- [26] S. Klaumünzer, M. Hou, and G. Schumacher. *Phys. Rev. Lett.*, 57 (7):850 – 853, 1986.
- [27] S. Klaumünzer, Ch. Li, S. Löffler, M. Rammensee, and G. Schumacher. *Nucl. Instr. Meth. B*, 39 (1 - 4):665 – 669, 1989.
- [28] S. Klaumünzer, Ch. Li, S. Löffler, M. Rammensee, G. Schumacher, and H.Ch. Neitzert. *Rad. Eff. Def. Solids*, 108 (1):131 – 135, 1989.
- [29] A. Audouard, E. Balanzat, J.C. Jousset, G. Fuchs, D. Lesueur, and L. Thomé. *Nucl. Instr. Meth. B*, 39 (1 - 4):18 – 21, 1989.
- [30] M. Hou, S. Klaumünzer, and G. Schumacher. *Phys. Rev. B*, 41 (2):1144 – 1157, 1990.
- [31] S. Klaumünzer and A. Benyagoub. *Phys. Rev. B*, 43 (10):7502 – 7506, 1991.
- [32] L. Cliche, S. Roorda, M. Chicoine, and R.A. Masut. *Phys. Rev. Lett.*, 75 (12):2348 – 2351, 1995.
- [33] A. Gutzmann and S. Klaumünzer. *Nucl. Instr. Meth. B*, 127 - 128:12 – 17, 1997.
- [34] C. Trautmann, S. Klaumünzer, and H. Trinkaus. *Phys. Rev. Lett.*, 85 (17):3648 – 3651, 2000.
- [35] T. van Dillen, A. Polman, C.M. van Kats, and A. van Blaaderen. *Appl. Phys. Lett.*, 83 (21):4315 – 4317, 2003.
- [36] A. Hedler, S. Klaumünzer, and W. Wesch. *Nat. Mat.*, 3:804 – 809, 2004.
- [37] S. Klaumünzer. *Nucl. Instr. Meth. B*, 215 (3 - 4):345 – 352, 2004.
- [38] A. Hedler, S. Klaumünzer, and W. Wesch. *Phys. Rev. B*, 72 (5):054108, 2005.
- [39] S. Klaumünzer. *Ion Beam Science: Solved and Unsolved Problems S. 293*. Royal Danish Academy of Sciences and Letters, Copenhagen, 2006.
- [40] A.I. Ryazanov, A.E. Volkov, and S. Klaumünzer. *Phys. Rev. B*, 51 (18):12107 – 12115, 1995.
- [41] H. Trinkaus and A.I. Ryazanov. *Phys. Rev. Lett.*, 74 (25):5072 – 5075, 1995.
- [42] H. Trinkaus. *J. Nucl. Mat.*, 223 (2):196 – 201, 1995.
- [43] H. Trinkaus. *Nucl. Instr. Meth. B*, 107 (1 - 4):155 – 159, 1996.
- [44] H. Trinkaus. *J. Nucl. Materials*, 246 (2 - 3):244 – 246, 1997.
- [45] H. Trinkaus. *Nucl. Instr. Meth. B*, 146 (1 - 4):204 – 216, 1998.

- [46] I.H. Wilson. *J. Appl. Phys.*, 53 (3):1698 – 1705, 1982.
- [47] B.R. Appleton, O.W. Holland, J. Narayan, O.E. Schow, J.S. Williams, K.T. Short, and E. Lawson. *Appl. Phys. Lett.*, 41 (8):711 – 712, 1982.
- [48] O.W. Holland, B.R. Appleton, and J. Narayan. *J. Appl. Phys.*, 54 (5):2295 – 2301, 1983.
- [49] B.R. Appleton, O.W. Holland, D.B. Poker, J. Narayan, and D. Fathy. *Nucl. Instr. Meth. B*, 7/8:639 – 644, 1985.
- [50] L.M. Wang and R.C. Birtcher. *Phil. Mag. A*, 64 (6):1209 – 1223, 1991.
- [51] B. Stritzker, R.G. Elliman, and J. Zou. *Nucl. Instr. Meth. B*, 175 - 177:193 – 196, 2001.
- [52] T. Janssens, C. Huyghebaert, D. Vanhaeren, G. Winderickx, A. Satta, M. Meuris, and W. Vandervorst. *J. Vac. Sci. Tech. B*, 24 (1):510 – 514, 2006.
- [53] L. Ottaviano, A. Verna, V. Grossi, P. Parisse, S. Piperno, M. Passacantando, G. Impellizzeri, and F. Priolo. *Surf. Sci*, 601:2623 – 2627, 2007.
- [54] J. Yanagisawa, K. Takarabe, K. Ogushi, K. Gamo, and Y. Akasaka. *J. Phys.: Condens. Matter*, 19:445002, 2007.
- [55] L. Romano, G. Impellizzeri, M.V. Tomasello, F. Giannazzo, C. Spinella, and M.G. Grimaldi. *J. Appl. Phys.*, 107 (8):084314, 2010.
- [56] B.L. Darby, B.R. Yates, N.G. Rudawski, K.S. Jones, A. Kontos, and R.G. Elliman. *Thin Solid Films*, 519 (18):5962 – 5965, 2011.
- [57] H. Huber, W. Assmann, R. Grötzschel, H.D. Mieskes, A. Mücklich, H. Nolte, and W. Prusseit. *Mat Science Appl. Ion Beam Techn.*, 248 - 249:301 – 312, 1997.
- [58] H. Huber, W. Assmann, S.A. Karamian, A. Mücklich, W. Prusseit, B. Gazis, R. Grötzschel, M. Kokkoris, E. Kossionidis, H.D. Mieskes, and R. Vlastou. *Nucl. Instr. Meth. B*, 122 (3):542 – 546, 1997.
- [59] H. Föll, J. Carstensen, and S. Frey. *J. Nanomat.*, 2006:1 – 10, 2006.
- [60] H. Föll, M. Leisner, A. Cojocar, and J. Carstensen. *Materials*, 3:3006 – 3076, 2010.
- [61] G. Kaltsas and A.G. Nassiopoulou. *Sensors and Actuators A: Physical*, 76 (1 - 3):133 – 138, 1999.
- [62] G. Korotcenkova and B.K. Cho. *Crit. Rev. in Solid State and Mat. Sciences*, 35 (3):153 – 260, 2010.
- [63] S. Gold, K.-L. Chu, C. Lu, M.A. Shannon, and R.I. Masel. *J. Power Sources*, 135 (1 -2):198 – 203, 2004.
- [64] K. Busch. *Photonic crystals: advances in design, fabrication, and characterization*. Wiley-VCH, Weinheim, 2004.
- [65] D. Sun, A.E. Riley, A.J. Cadby, E.K. Richman, S.D. Korlann, and S.H. Tolbert. *Nature*, 441:1126 – 1130, 2006.
- [66] <http://www.srim.org/>.
- [67] J.F.Ziegler, J.P. Biersack, and U. Littmark. *The Stopping and Range of Ions in Solids*. Oxford: Pergamon, 2003.
- [68] J. Lindhard, M. Scharff, and H.E. Schiøtt. *Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selslt.*, 33 (14):1 – 42, 1963.

- [69] N. Bohr. *Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selslt.*, 18 (8):1 – 144, 1948.
- [70] A. Sommerfeld. *Z. f. Physik*, 78 (5/6):283 – 308, 1932.
- [71] G. Molière. *Zeitschrift Naturforschung Teil A*, 2:133 – 146, 1947.
- [72] W. Lenz. *Z. f. Physik*, 77 (11/12):713 – 721, 1932.
- [73] H. Jensen. *Z. f. Physik*, 77 (11 / 12):722 – 745, 1932.
- [74] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, and U. Littmark. *The Stopping and Range of Ions in Solid*. Pergamon Press, 1985.
- [75] G. Schiwietz, K. Czerski, M. Roth, F. Staufenbiehl, and P.L. Grande. *Nucl. Instr. Meth. B*, 225 (1 - 2):4 – 26, 2004.
- [76] J. Lindhard and M. Scharff. *Phys. Rev.*, 124:128 – 130, 1961.
- [77] O.B. Firsov. *Sov. Phys. -JETP*, 8:1076, 1959.
- [78] H. Bethe. *Ann. d. Phys.*, 397 (3):325 – 400, 1930.
- [79] F. Bloch. *Ann. d. Phys.*, 16 (3):285 – 320, 1933.
- [80] J.P. Biersack and D. Fink. *Channeling, Blocking, and Range Measurements Using Thermal Neutron Induced Reactions*. In Atomic Collisions in Solids, S. Datz, B.R. Appleton, and C.D. Moak, New York, Plenum Press, page: 737-747, 1975.
- [81] D.V. Morgan. *Channeling*. John Wiley & Sons, 1973.
- [82] D.S. Gemmell. *Rev. Mod. Phys.*, 46(1):129–227, 1974.
- [83] M.T. Robinson and O.S. Oen. *Appl. Phys. Lett.*, 2 (2):30 – 32, 1963.
- [84] M.T. Robinson and O.S. Oen. *Phys. Rev.*, 132 (6):2385 – 2398, 1963.
- [85] G.R. Piercy, F. Brown, J.A. Davies, and M. McCargo. *Phys. Rev. Lett.*, 10 (9):399 – 400, 1963.
- [86] F. Schrempel, T. Steinbach, Th. Gischkat, and W. Wesch. *Nucl. Instr. Meth. B*, 266 (12/13):2958 – 2961, 2008.
- [87] T. Steinbach, F. Schrempel, Th. Gischkat, and W. Wesch. *Phys. Rev. B*, 78 (18):184106, 2008.
- [88] J. Lindhard. *Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selslt.*, 34 (14):1 – 64, 1965.
- [89] J.J. Loferski and P. Rappaport. *Phys. Rev.*, 111 (2):432 – 439, 1958.
- [90] W.L. Brown and W.M. Augustyniak. *J. Appl. Phys.*, 30 (8):1300 – 1309, 1959.
- [91] P.M. Mooney and J.C. Bourgoin. *Phys. Rev. B*, 29 (4):1962 – 1965, 1984.
- [92] J. F. Gibbons. *IEEE Proceedings*, 60 (9):1062 – 1096, 1972.
- [93] F.F. Morehead and B.L. Crowder. *Rad. Eff. Def. Solids*, 6 (1):27 – 32, 1970.
- [94] D.A. Thompson. *Rad. Eff. Def. Solids*, 56 (3 - 4):105 – 150, 1981.
- [95] N. Hecking, K.F. Heidemann, and E. Te Kaat. *Nucl. Instr. Meth. B*, 15 (1 - 6):760 – 764, 1986.

- [96] M. Hayes, A. Schroeter, E. Wendler, W. Wesch, F.D. Aurret, and J.M. Nel. *Phys. Stat. Sol.*, 5 (2):583 – 586, 2008.
- [97] M. Hayes, A. Schroeter, E. Wendler, W. Wesch, F.D. Aurret, and J.M. Nel. *Physica B: Cond. Matt.*, 404 (22):4382 – 4385, 2009.
- [98] E. Wendler. *Nucl. Instr. Meth. B*, 267 (16):2680 – 2689, 2009.
- [99] A. Mozumder. *J. Chem. Phys.*, 60 (3):1145 – 1148, 1974.
- [100] J. Faïn, M. Monnin, and M. Montret. *Rad. Res.*, 57 (3):379 – 389, 1974.
- [101] A. Chatterjee and H.J. Schaefer. *Rad. Env. Biophys.*, 13 (3):215 – 227, 1976.
- [102] G. Schiwietz, G. Xiao, P.L. Grande, E. Luderer, R. Pazirandeh, and U. Stettner. *Nucl. Instr. Meth. B*, 146 (1 - 4):131 – 136, 1998.
- [103] G. Schiwietz, G. Xiao, E. Luderer, and P.L. Grande. *Nucl. Instr. Meth. B*, 164 -165:353 – 364, 2000.
- [104] R.L. Fleischer, P.B. Price, and R.M. Walker. *J. Appl. Phys.*, 36 (11):3645 – 3652, 1965.
- [105] P. Stampfli and K.H. Bennemann. *Phys. Rev. B*, 49 (11):7299 – 7305, 1994.
- [106] P. Stampfli. *Nucl. Instr. Meth. B*, 107 (1 - 4):138 – 145, 1996.
- [107] T.A. Tombrello. *Nucl. Instr. Meth. B*, 94 (4):424 – 428, 1994.
- [108] M. Toulemonde, C. Dufour, and E. Paumier. *Phys. Rev. B*, 46 (22):14362 – 14369, 1992.
- [109] M. Toulemonde, E. Paumier, and C. Dufour. *Rad. Eff. Def. Solids*, 126 (1 - 4):201 – 206, 1993.
- [110] Z.G. Wang, C. Dufour, E. Paumier, and M. Toulemonde. *J. Phys. Condens. Matter*, 6 (34):6733 – 6750, 1994.
- [111] M. Toulemonde, Ch. Dufour, A. Meftah, and E. Paumier. *Nucl. Instr. Meth. B*, 166 - 167:903 – 912, 2000.
- [112] A. Meftah, F. Brisard, J.M. Costantini, E. Dooryhee, M. Hage-Ali, M. Hervieu, J.P. Stoquert, F. Studer, and M. Toulemonde. *Phys. Rev. B*, 49 (18):12457 – 12463, 1994.
- [113] A. Meftah, J.M. Costantini, N. Khalfaoui, S. Boudjadar, J.P. Stoquert, F. Studer, and M. Toulemonde. *Nucl. Instr. Meth. B*, 237 (3 - 4):563 – 574, 2005.
- [114] F. Seitz and J. S. Koehler. *Solid State Phys.*, 2:305 – 448, 1956.
- [115] M. Toulemonde, Ch. Dufour, Z. Wang, and E. Paumier. *Nucl. Instr. Meth. B*, 112 (1 - 4):26 – 29, 1996.
- [116] P.B. Allen. *Phys. Rev. Lett.*, 59 (13):1460 – 1463, 1987.
- [117] S.D. Brorson, A. Kazeroonian, J.S. Moodera, D.W. Face, T.K. Cheng, E.P. Ippen, M.S. Dresselhaus, and G. Dresselhaus. *Phys. Rev. Lett.*, 64 (18):2172 – 2175, 1990.
- [118] C. Suárez, W.E. Bron, and T. Juhasz. *Phys. Rev. Lett.*, 75 (24):4536 – 4539, 1995.
- [119] V.E. Gusev and O.B. Wright. *Phys. Rev. B*, 57 (5):2878 – 2888, 1998.
- [120] L. Huang, E.N. Glezer J.P. Callan, and E. Mazur. *Phys. Rev. Lett.*, 80 (1):185 – 188, 1998.

- [121] A. Meftah, J.M. Costantini, M. Djebara, N. Khalfaoui, J.P. Stoquert, F. Studer, and M. Toulemonde. *Nucl. Instr. Meth. B*, 122 (3):470 – 475, 1997.
- [122] A. Kamarou, W. Wesch, E. Wendler, A. Undisz, and M. Rettenmayr. *Phys. Rev. B*, 73 (18):184107, 2006.
- [123] D. Lesueur and A. Dunlop. *Rad. Eff. Def. Solids*, 126 (1 - 4):163 – 172, 1993.
- [124] R.L. Fleischer, P.B. Price, and R.M. Walker. *Nuclear Tracks in Solids*. University of California Press, Berkeley, 1975.
- [125] A. Dunlop, P. Legrand, D. Lesueur, N. Lorenzelli, J. Morillo, A. Barbu, and S. Bouffard. *Europhys. Lett.*, 15 (7):765, 1991.
- [126] P.K. Haff. *Appl. Phys. Lett.*, 29 (8):473 – 475, 1976.
- [127] T. Schenkel, A.V. Hamza, A.V. Barnes, D.H. Schneider, J.C. Banks, and B.L. Doyle. *Phys. Rev. Lett.*, 81 (12):2590 – 2593, 1998.
- [128] G. Szenes. *Mat. Sci. For.*, 97 - 99:647 – 652, 1992.
- [129] G. Szenes. *Nucl. Instr. Meth. B*, 116 (1 - 4):141 – 144, 1996.
- [130] G. Szenes, Z.E. Horváth, B. Pécz, F. Pászti, and L. Tóth. *Phys. Rev. B*, 65 (4):045206, 2002.
- [131] G. Szenes. *J. Nucl. Mat.*, 336 (1):81 – 89, 2005.
- [132] A. Meftah, M. Djebara, J. P. Stoquert, F. Studer, and M. Toulemonde. *Nucl. Instr. Meth. B*, 107 (1 - 2):242 – 245, 1996.
- [133] E.M. Bringa and R.E. Johnson. *Phys. Rev. Lett.*, 88 (16):165501, 2002.
- [134] O. Herre, W. Wesch, E. Wendler, P.I. Gaiduk, F.F. Komarov, S. Klaumünzer, and P. Meier. *Phys. Rev. B*, 58 (8):4832 – 4837, 1998.
- [135] A.S. Khalil, L.T. Chadderton, A.M. Stewart, M.C. Ridgway, D.J. Llewellyn, and A.P. Byrne. *Rad. Measurements*, 40 (2- 6):770 – 774, 2005.
- [136] F.F. Komarov, A.F. Komarov, and A.M. Mironov. *Nucl. Instr. Meth. B*, 148 (1 - 4):159 – 163, 1999.
- [137] Z.G. Wang, Ch. Dufour, B. Cabeau, J. Dural, G. Fuchs, E. Paumier, F. Pawlak, and M. Toulemonde. *Nucl. Instr. Meth. B*, 107 (1 - 4):175 – 180, 1996.
- [138] S. Ghosh, D.K. Avasthi, T. Som, A. Tripathi, S.K. Srivastava, F. Grüner, and W. Assmann. *Nucl. Instr. Meth. B*, 212:431 – 435, 2003.
- [139] A. Kamarou, W. Wesch, E. Wendler, and S. Klaumünzer. *Nucl. Instr. Meth. B*, 225 (1 - 2):129 – 135, 2004.
- [140] P. Mary, P. Bogdanski, M. Toulemonde, R. Spohr, and J. Vetter. *Nucl. Instr. Meth. B*, 62 (3):391 – 393, 1992.
- [141] M. Levalois and P. Marie. *Nucl. Instr. Meth. B*, 156 (1 - 4):64 – 71, 1999.
- [142] T. van Dillen, M.Y.S. Siem, and A. Polman. *Appl. Phys. Lett.*, 85 (3):389 – 391, 2004.
- [143] A. Audouard, E. Balanzat, J.C. Jousset, D. Lesueur, and L. Thomé. *J. Phys. Condens. Matter*, 5 (8):995 – 1018, 1993.

- [144] A. Gutzmann, S. Klaumünzer, A. Benyagoub, and D. Nagengast. *Rad. Eff. Def. Solids*, 126:133 – 136, 1993.
- [145] T. van Dillen, M.J.A. de Dood, J.J. Penninkhof, A. Polman, S. Roorda, and A.M. Vredenberg. *Appl. Phys. Lett.*, 84 (18):3591 – 3593, 2004.
- [146] J.D. Eshelby. *Proc. Of the Royal Society of London, Series A*, 241:376 – 396, 1957.
- [147] G.G. Stoney. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, 82:172 – 175, 1909.
- [148] O. Madelung, M. Schulz, and H. Weiss.: Landolt-Börnstein: New Series, Group III Vol. 17a. Springer-Verlag, 1982.
- [149] <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/Ge/index.html>.
- [150] M. Cardona, K.L. Shaklee, and F.H. Pollak. *Phys. Rev.*, 154 (3):696 – 720, 1967.
- [151] J. Sládková. *Czech. J. Phys. B*, 18 (6):801 – 806, 1968.
- [152] D. Klinger, J. Auleytner, and D. Zymierska. *Cryst. Res. Technol.*, 32 (7):983 – 987, 1997.
- [153] A. Filipponi and A. Di Cicco. *Phys. Rev. B*, 51 (18):12322 – 12336, 1995.
- [154] M. Posselt and A. Gabriel. *Phys. Rev. B*, 80 (4):045202, 2009.
- [155] M.B. Prince. *Phys. Rev.*, 92 (3):681 – 687, 1953.
- [156] F.J. Morin and J.P. Maita. *Phys. Rev.*, 94 (6):1525 – 1528, 1954.
- [157] A.H. Clark. *Phys. Rev.*, 154 (3):750 – 757, 1967.
- [158] R.J. Temkin, W. Paul, and G.A.N. Connel. *Adv. Phys.*, 22 (5):581 – 641, 1973.
- [159] A. Witvrouw and F. Spaepen. *J. Appl. Phys.*, 74 (12):7154 – 7161, 1993.
- [160] G. Dalba, P. Fornasini, M. Grazioli, and F. Rocca. *Phys. Rev. B*, 52 (15):11034 – 11043, 1995.
- [161] M.C. Ridgway, C.J. Glover, K.M. Yu, G.J. Foran, C. Clerc, J.L. Hansen, and A. Nylandsted Larsen. *Phys. Rev. B*, 61 (19):12586 – 12589, 2000.
- [162] C.J. Glover, M.C. Ridgway, K.M. Yu, G.J. Foran, C. Clerc, J.L. Hansen, and A. Nylandsted-Larsen. *J. Synchrotron Radiation*, 8 (2):773 – 775, 2001.
- [163] C.J. Glover, M.C. Ridgway, K.M. Yu, G.J. Foran, D. Desnica-Frankovic, C. Clerc, J.L. Hansen, and A. Nylandsted-Larsen. *Phys. Rev. B*, 63 (7):073204, 2001.
- [164] M.C. Ridgway, C.J. Glover, G. de M. Azevedo, S.M. Kluth, K.M. Yu, and G.J. Foran. *Nucl. Instr. Meth. B*, 238 (1 - 4):294 – 301, 2005.
- [165] T.C. Hufnagel. *Nat. Mat.*, 3:666 – 667, 2004.
- [166] J.S. Lannin, N. Maley, and S.T. Kshirsagar. *Solid State Communications*, 53 (11):939 – 942, 1985.
- [167] K.W. Wang, W.G. Spitzer, G.K. Hubler, and E.P. Donovan. *J. Appl. Phys.*, 57 (8):2739 – 2752, 1985.
- [168] K. Laaziri, S. Roorda, and J.M Baribeau. *J. Non-crystal. Solids*, 191 (1 - 2):193 – 199, 1995.
- [169] C. Mathioudakis and P.C Kelires. *J. Non-crystal. Solids*, 266 - 269:161 – 165, 2000.

- [170] S. Decoster and A. Vantomme. *J. Phys. D*, 42 (16):165404, 2009.
- [171] K. Nordlund, M. Ghaly, R.S. Averback, M. Caturla, T. Diaz de la Rubia, and J. Tarus. *Phys. Rev. B*, 57 (13):7556 – 7570, 1998.
- [172] K. Nordlund, J. Peltola, J. Nord, J. Keinonen, and R.S. Averback. *J. Appl. Phys.*, 90 (4):1710 – 1718, 2001.
- [173] W. Wesch, A. Kamarou, E. Wendler, A. Undisz, and M. Rettenmayr. *Nucl. Instr. Meth. B*, 257 (1 - 2):283 – 286, 2007.
- [174] A. Kamarou. *Radiation effects and damage formation in semiconductors due to high-energy ion irradiation*. PhD thesis, Friedrich-Schiller-Universität Jena, 2006.
- [175] P. Marie, M. Levalois, and P. Bogdanski. *J. Appl. Phys.*, 74 (2):868 – 871, 1993.
- [176] P. Marie and M. Levalois. *J. Appl. Phys.*, 75 (3):1852 – 1854, 1994.
- [177] F.F. Komarov, P.I. Gaiduk, L.A. Vlasukova, A.J. Didyk, and V.N. Yuvchenko. *Vacuum*, 70 (2 - 3):75 – 79, 2003.
- [178] A. Colder, O. Marty, B. Canut, M. Levalois, P. Marie, X. Portier, S.M.M. Ramos, and M. Toulemonde. *Nucl. Instr. Meth. B*, 174 (4):491 – 498, 2001.
- [179] R.J. Kaiser, S. Koffel, P. Pichler, A.J. Bauer, B. Amon, A. Claverie, G. Benassayag, P. Scheiblin, L. Frey, and H. Ryssel. *Thin Solid Films*, 518 (9):2323 – 2325, 2010.
- [180] T.E. Haynes and O.W. Holland. *Appl. Phys. Lett.*, 59 (4):452 – 455, 1991.
- [181] W. Wesch, C.S. Schnohr, P. Kluth, Z.S. Hussain, L.L. Araujo, R. Giulian, D.J. Sprouster, A.P. Byrne, and M.C. Ridgway. *J. Phys. D*, 42 (11):115402, 2009.
- [182] G.L. Destefanis and J.P. Gailliard. *Appl. Phys. Lett.*, 36 (1):40 – 42, 1980.
- [183] R. Callec, P.N. Favennec, M. Salvi, H. L’Haridon, and M. Gauneau. *Appl. Phys. Lett.*, 59 (15):1872 – 1874, 1991.
- [184] M. Shaanan, R. Kalish, and V. Richter. *Nucl. Instr. Meth. B*, 7 - 8:443 – 447, 1985.
- [185] R. Callec and A. Poudoulec. *J. Appl. Phys.*, 73 (10):4831 – 4835, 1993.
- [186] N. Nitta, M. Taniwaki, Y. Hayashi, and T. Yoshiie. *J. Appl. Phys.*, 92 (4):1799 – 1802, 2002.
- [187] S.M. Kluth, J.D.F. Gerald, and M.C. Ridgway. *Appl. Phys. Lett.*, 86 (13):131920, 2005.
- [188] S.M. Kluth, B. Johannessen, P. Kluth, C.J. Glover, G.J. Foran, and M.C. Ridgway. *Nucl. Instr. Meth. B*, 238 (1 -4):264 – 267, 2005.
- [189] S.M. Kluth, D. Llewellyn, and M.C. Ridgway. *Nucl. Instr. Meth. B*, 242 (1 - 2):640 – 642, 2006.
- [190] A.G. Perez-Bergquist, K. Li, Y. Zhang, and L. Wang. *Nanotechnology*, 21 (32):325602, 2010.
- [191] C.C. Jacobi, T. Steinbach, and W. Wesch. *Nucl. Instr. Meth. B*, in press, 2011.
- [192] T. Steinbach and W. Wesch. *in Vorbereitung*.
- [193] <http://www.crystec.de/datenblaetter-d.html>.
- [194] <http://www.pi-kem.co.uk/>.

- [195] <http://www.plano-em.de/katalog/pdf/Kapitel-1.pdf>.
- [196] T. Steinbach, J. Wernecke, P. Kluth, M.C. Ridgway, and W. Wesch. *Phys. Rev. B*, 84 (10):104108, 2011.
- [197] M. Wakaki, M. Iwase, Y. Show, K. Koyama, S. Sato, S. Nozaki, and H. Morisaki. *Physica B: Cond. Matt.*, 219 - 220:535 – 537, 1996.
- [198] M. Mulato, D. Toet, G. Aichmayr, P.V. Santos, and I. Chambouleyron. *Appl. Phys. Lett.*, 70 (26):3570 – 3572, 1997.
- [199] Y. Yang, X. Mao, H. Li, Z. Zhou, S. Jiang, X. Wu, S. Huang, and P. Zhang. *Physica E*, 8:72 – 76, 2000.
- [200] Z.H. Cao, P. Liu, X.K. Meng, S.C. Tang, and H.M. Lu. *Appl. Phys. A: Mat. Science Proc.*, 94 (2):393 – 398, 2009.
- [201] G. Kartopu, A.V. Sapelkin, V.A. Karavanskii, U. Serincan, and R. Turan. *J. Appl. Phys.*, 103 (11):113518, 2008.
- [202] T. Arnold, G. Böhm, R. Fechner, J. Meister, A. Nickel, F. Frost, T. Hänsel, and A. Schindler. *Nucl. Instr. Meth. A*, 616 (2 - 3):147 – 156, 2010.
- [203] T. Steinbach and W. Wesch. in *Vorbereitung*.
- [204] J. Kempf, M. Nonnenmacher, and H.H. Wagner. *Appl. Phys. A*, 56 (4):385 – 390, 1993.
- [205] T. Steinbach, C.S. Schnohr, P. Kluth, R. Giuliani, L.L. Araujo, D.J. Sprouster, M.C. Ridgway, and W. Wesch. *Phys. Rev. B*, 83 (5):054113, 2011.
- [206] T. Steinbach, D. Severin, M. Bender, C. Trautmann, and W. Wesch. in *Vorbereitung*.
- [207] A. Kamarou, E. Wendler, and W. Wesch. *J. Appl. Phys.*, 97 (12):123532, 2005.
- [208] K. Gärtner, J. Jöhrens, T. Steinbach, C.S. Schnohr, M.C. Ridgway, and W. Wesch. *Phys. Rev. B*, 83 (22):224106, 2011.
- [209] S.B. Fisher and K.R. Williams. *Rad. Eff.*, 14 (3 - 4):165 – 170, 1972.
- [210] E. Kuramoto and T. Tsutsumi. *J. Nucl. Mat.*, 212 - 215:175 – 178, 1994.
- [211] V. Zhikharev and F. Batyrshin. *MRS Symposium Proceedings: Modeling and simulation of thin-film Processing*, 389:155 – 159, 1995.
- [212] T.K. Chaki and J.C.M. Li. *Phil. Mag. B*, 51 (5):557 – 565, 1985.
- [213] P. Chaudhari, F. Spaepen, and P. Steinhardt. *Glassy Metals II*. Springer, Berlin, 1983.
- [214] R. Bullough, M.R. Hayns, and M.H. Wood. *J. Nucl. Mat.*, 90 (1 - 3):44 – 59, 1980.
- [215] D.R. Lim, C.S. Rafferty, and F.P. Klemens. *Appl. Phys. Lett.*, 67 (16):2302 – 2304, 1995.
- [216] B. Colombeau, N.E.B. Cowern, F. Cristiano, P. Calvo, N. Cherkashin, Y. Lamrani, and A. Claverie. *Appl. Phys. Lett.*, 83 (10):1953 – 1955, 2003.
- [217] C.J. Ortiz, P. Pichler, T. Fühner, F. Cristiano, B. Colombeau, N.E.B. Cowern, and A. Claverie. *J. Appl. Phys.*, 96 (9):4866 – 4877, 2004.
- [218] K.D. Li, A. Perez-Bergquist, and L. Wang. *Nucl. Instr. Meth. B*, 267 (18):3063 – 3066, 2009.

- [219] M.V. Matyushin. *Tech. Phys.*, 44 (7):804 – 806, 1999.
- [220] X.J. Li and K.H. Su. *Theor. Chem. Accounts*, 124 (5 - 6):345 – 354, 2009.
- [221] M.F. Millea. *J. Phys. and Chem. Solids*, 27 (2):309 – 314, 1966.
- [222] A. Strohm, S. Matics, and W. Frank. *Def. and Diff. Forum*, 194 - 199:629 – 634, 2001.
- [223] I.R. Cox-Smith, H.C. Liang, and R.O. Dillon. *J. Vac. Sci. Tech. A*, 3 (3):674 – 677, 1985.
- [224] G. Carter. *Rad. Eff.*, 43 (4 - 5):193 – 199, 1979.
- [225] A. Audouard, E. Balanzat, G. Fuchs, J.C. Jousset, D. Lesueur, and L. Thomé. *Europhys. Lett.*, 5 (3):241 – 246, 1988.
- [226] S. Klaumünzer. *Mat. Sci. For.*, 97 - 99:623 – 630, 1992.
- [227] A. Audouard, E. Balanzat, G. Fuchs, J.C. Jousset, D. Lesueur, and L. Thomé. *Europhys. Lett.*, 3 (3):327 – 331, 1987.
- [228] G. Schiwietz, M. Roth, K. Czerski, F. Staufenbiel, M. Rösler, and P.L. Grande. *Nucl. Instr. Meth. B*, 209:26 – 31, 2003.
- [229] E.P. Donovan, F. Spaepen, D. Turnbull, J.M. Poate, and D.C. Jacobson. *Appl. Phys. Lett.*, 42 (8):698 – 700, 1983.
- [230] B.M. Paine and R.S. Averback. *Nucl. Instr. Meth. B*, 7 - 8 (2):666 – 675, 1985.
- [231] Y.T. Cheng. *Mat. Sci. Rep.*, 5:45 – 97, 1990.
- [232] M. Nastasi and J.W. Mayer. *Mat. Sci. and Engineering*, R12:1 – 52, 1994.
- [233] W. Bolse. *Mat. Sci. and Engineering A*, 253 (1 - 2):194 – 201, 1998.
- [234] M. Chicoine, S. Roorda, L. Cliche, and R.A. Masut. *Phys. Rev. B*, 56 (3):1551 – 1560, 1997.
- [235] C.A. Volkerts. *J. Appl. Phys.*, 70 (7):3521 – 3527, 1991.
- [236] C.A. Volkerts. *J. Appl. Phys.*, 74 (12):7107 – 7113, 1993.
- [237] E. Snoeks, A. Polman, and C.A. Volkert. *Appl. Phys. Lett.*, 65 (19):2487 – 2489, 1994.
- [238] E. Snoeks, T. Weber, A. Cacciato, and A. Polman. *J. Appl. Phys.*, 78 (7):4723 – 4732, 1995.
- [239] K. Gärtner. *Nucl. Instr. Meth. B*, 227 (4):522 – 530, 2005.
- [240] C.P. Scott, A.J. Craven, P. Hatto, and C. Davies. *J. Microscopy*, 182 (3):186 – 191, 1996.
- [241] L. Verlet. *Phys. Rev.*, 159 (1):98 – 103, 1967.
- [242] F.H. Stillinger and T.A. Weber. *Phys. Rev. B*, 31 (8):5262 – 5271, 1985.
- [243] K. Gärtner and K. Hehl. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 94:231 – 238, 1979.
- [244] K. Ding and H.C. Anderson. *Phys. Rev. B*, 34 (10):6987 – 6991, 1986.
- [245] B. Weber, K. Gärtner, and D.M. Stock. *Nucl. Instr. Meth. B*, 127 / 128:239 – 243, 1997.
- [246] M.P.R. Waligórski, R.N. Hamm, and R. Katz. *Int. J. Radiat. Appl. Instrum., Part D*, 11 (6):309 – 319, 1986.
- [247] C. Dufour, E. Paumier, and M. Toulemonde. *Rad. Eff. Def. Solids*, 126 (1 - 4):119 – 122, 1993.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Energieverluste von Au-Ionen in Ge	8
2.2	Zeitliche Entwicklung der deponierten Energie in einer Ionenspur	14
2.3	Plastische Deformation: Ionen-Hämmerungseffekt	20
2.4	Plastische Deformation: Ionenstrahlinduzierte Scherung	22
2.5	Plastische Deformation: Ionenstrahlinduzierte Biegung	23
2.6	Plastische Deformation: Ionenstrahlinduziertes plastisches Fließen . . .	24
2.7	Plastische Deformation in EFT-Näherung	27
2.8	Ionenstrahlinduzierte Strukturmodifikation in GaSb	35
3.1	Probenpräparation und Geometrie der Ionenbestrahlung	36
3.2	Amorphisierung von c-Ge mittels Ge-Mehrfachbestrahlung	37
3.3	Energieverlust von Au-Ionen in Ge	39
4.1	Amorphisierung von c-Ge mit 3 MeV I-Ionen	42
4.2	Raman-Spektroskopie von ionenbestrahltem Ge	43
4.3	Vertikale Volumenausdehnung von Ge infolge der Amorphisierung . . .	43
4.4	Volumenausdehnung nach LEI-Hochfluenzbestrahlung (RT)	44
4.5	Fluenzabhängige Verfärbung der Ge-Probenoberfläche	46
4.6	cs-EM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	47
4.7	cs-SEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	48
4.8	cs-TEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	49
4.9	cs-SEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	50
4.10	Vergleich von porösen und amorphen Schichtdicken	51
4.11	Relative Dichteänderung α	51
4.12	pv-SEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	53
4.13	pv-SEM-Aufnahme einer LEI-bestrahlten Ge-Probe	53
4.14	pv- und cs-SEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	54
4.15	Ionenstrahlinduzierte Oberflächenrauigkeit	55
4.16	Volumenausdehnung nach LEI-Hochfluenzbestrahlung (LNT)	56
4.17	cs-SEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	58

4.18	pv-SEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	58
4.19	Bestrahlungsgeometrie bei LNT-Bestrahlung	59
4.20	Deformation der Probenoberfläche im Grenzbereich bestrahlt-unbestrahlt	59
4.21	Volumenausdehnung nach LEI-Hochfluenzbestrahlung	61
4.22	cs-SEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	62
4.23	Volumenausdehnung nach LEI-Hochfluenzbestrahlung ($E = 380$ keV) .	63
4.24	cs-SEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	64
4.25	cs-SEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	65
4.26	pv-SEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	66
4.27	pv-SEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	66
4.28	cs-SEM-Aufnahmen von LEI-bestrahlten Ge-Proben	67
4.29	Lichtmikroskopaufnahme einer strukturierten Ge-Probenoberfläche nach SHI-Bestrahlung bei Raumtemperatur	68
4.30	Volumenausdehnung von c- und a-Ge-Proben nach SHI-Bestrahlung (RT)	69
4.31	cs-SEM-Aufnahme einer SHI-bestrahlten a-Ge-Probe	71
4.32	cs-SEM-Aufnahmen von SHI-bestrahlten a-Ge-Proben	72
4.33	cs-SEM-Aufnahme einer SHI-bestrahlten c- und a-Ge-Probe	73
4.34	Volumenausdehnung von a-Ge-Proben nach SHI-Bestrahlung (TT) . . .	74
4.35	cs-SEM-Aufnahme einer SHI-bestrahlten a-Ge-Probe	75
4.36	Zeitliche Entwicklung der MD-Zelle infolge einer definierten Energiede- ponierung	76
4.37	Relative fluenzabhängige Volumenausdehnung der MD-Zelle für verschie- dene Simulationsparameter	77
4.38	Momentaufnahmen der zeitlichen Entwicklung der MD-Zelle infolge $Z = 3, 5, 7$ und 17 Depositionszyklen	78
4.39	Plastisches Fließen von a-Ge unter SHI-Bestrahlung	79
4.40	cs-SEM-Aufnahme einer schräg SHI-bestrahlten a-Ge-Probe	80
5.1	Ausdehnung der porösen Schichten in Abhängigkeit von der normierten Fluenz	83
5.2	Schwellwert des elektronischen Energieeintrags für Hohlraumformierung	87
5.3	Vergleich der tiefenabhängigen Energiedeponierung mit dem Tiefenprofil einer SHI-bestrahlten c-Ge-Probe	89
5.4	Räumlicher und zeitlicher Temperaturverlauf in der MD-Zelle nach einer einmaligen definierten Energiedeponierung.	90
5.5	Deformationsausbeute von a-Ge in Abhängigkeit von der pro Ion in elek- tronische Prozesse deponierten Energie	92
5.6	Plastische Deformation: Ionenstrahlinduzierte Wallstruktur	95
5.7	Ionenstrahlinduzierte Wallstruktur in Abhängigkeit von der Fluenz . .	97

Tabellenverzeichnis

2.1	Ausgewählte strukturelle und physikalische Eigenschaften von kristallinem Germanium.	29
4.1	Schwellwert-Fluenzen und Gradienten der vertikalen Volumenausdehnung infolge der Bestrahlung von Ge mit I-Ionen bei RT	46
4.2	Querschnitte und maximale Ausdehnung der Wallstruktur am Grenzbe- reich bestrahlt-unbestrahlt nach LEI-Tieftemperaturbestrahlung	60
4.3	Vertikale Volumenexpansion von a-Ge infolge SHI-Bestrahlung	71
5.1	Simulierte Volumenausdehnung in Abhängigkeit von der MD-Zellgröße und der in das System deponierten Energie	87
5.2	Abgeschätzte Werte der Deformationsausbeute von a-Ge	92
A.1	Nieder- und hochenergetische Bestrahlungen von Ge	Q
A.2	Experimentelle Bestrahlungsparameter der LEI- und SHI-Bestrahlungen	R

Abkürzungsverzeichnis

AFM	Rasterkraftmikroskopie (atomic force microscopy)	LDL	niederdichte flüssige Phase (low density liquid)
AIU	Astrophysikalisches Institut und Universitäts-Sternwarte	LEI	Niederenergiebestrahlung (low energy ion)
ANU	Australian National University	LNT	Flüssig-Stickstoff-Temperatur (liquid nitrogen temperature)
cs-/pv-	Querschnitt (cross-section) bzw. Draufsicht (plan-view)	MD	Molekulardynamische Computersimulation
CVD	chemische Gasphasenabscheidung (chemical vapor deposition)	MS	Makrostruktur
DICADA	Dechanneling in Crystals And Defect Analysis	OSI	Otto-Schott-Institut für Glaschemie
EDX	energiedispersive Röntgenspektroskopie (energy dispersive X-ray spectroscopy)	POS	poröse Oberflächenschicht
EFT	Effektive Fließtemperatur-Näherung	RBS	Rutherford-Weitwinkelstreuung (Rutherford backscattering spectrometry)
EM	Elektronenmikroskopie	RBS/C	Rutherford-Weitwinkelstreuung in Kanalisierungsrichtung
EME	Department of Electronic Materials Engineering	RS	Raman-Spektroskopie
EXAFS	Röntgenabsorptionsspektroskopie (extended X-ray absorption fine structure)	RT	Raumtemperatur
fcc	kubisch-flächenzentriert (face-centered cubic)	SD	Sputterdeposition
FSU	Friedrich-Schiller-Universität	SEM	Rasterelektronenmikroskopie
GSI	Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH	SHI	Hochenergiebestrahlung (swift heavy ion)
HDL	hochdichte flüssige Phase (high density liquid)	SRIM	Stopping and Range of Ions in Matter
HRF	Hohlraumformierung	TEM	Transmissionselektronenmikroskopie
IFK	Institut für Festkörperphysik	TT	Tieftemperatur
IMT	Institut für Materialwissenschaft und Werkstofftechnologie	TW	Temperatur-Wellenfront
LDA	niederdichte amorphe Phase (low density amorphous)	UNILAC	Universal Linear Accelerator
		VPS	vergrabene poröse Schicht

Symbolverzeichnis

α	relative Dichteänderung	$\underline{\underline{A}}$	Deformationstensor
α^{th}	linearer thermischer Ausdehnungskoeffizient	$\underline{\underline{k}}$	total-symmetrischer Fluiditätstensor 4. Stufe
Δx	Oberflächenverschiebung infolge plastischer Deformation	\underline{v}	Deformationsgeschwindigkeit
Δz	vertikale Volumenausdehnung infolge Hohlraumformierung	$\varepsilon_{e,MD}^{HRF}$	Schwellwert von ε_e für die Hohlraumformierung
Δz^{am}	vertikale Volumenausdehnung infolge Amorphisierung	$\varepsilon_e^{S_a}$	Schwellwert von ε_e für die Erzeugung von plastischen Deformationen
Δz_s	Materialabtrag durch Sputtererosion	ε_e^S	Schwellwert von ε_e für die Erzeugung von amorphen Ionen Spuren
Δz_W	vertikale Wall-Ausdehnung		
$\dot{\epsilon}_p$	Deformationsrate	ε_0	Dielektrizitätskonstante
$\epsilon_{r,\varphi,z}^*$	radiale, periphere und axiale Eindringtiefe	ε_{MD}	im Depositionszylinder deponierte Energie bei MD-Simulation
ϵ_{lok}	lokale plastische Deformation	$\varepsilon_{n,e}$	nukleare (n) und elektronische (e) Energiedeponierung pro Ion und Weglänge
η_S	Scherviskosität		
λ	Wärmeleitfähigkeit	A_0	Deformationsausbeute pro Ion
ν	Poisson- bzw. Wellenzahl	a_0	atomarer Abstand
$\overline{\varepsilon_e}$	über die amorphe Schicht gemittelter elektr. Energieeintrag	$b_{n,e}$	nuklearer (n) und elektronischer (e) Stoßparameter
\bar{q}	Gleichgewichtsladungszustand des Ions	c	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum
Φ	Ionenfluss	C	Wärmekapazität
ψ	kritischer Einfallswinkel für den Kanalisierungseffekt	C_p	spezifische Wärmekapazität
ρ	Massendichte	$d\sigma_{n,e}$	nuklearer (n) und elektronischer (e) Wirkungsquerschnitt
ρ_{el}	elektronische Energiedichte	D^T	transponierte Drehmatrix
σ^S	mechanische Spannung	D	Drehmatrix
$\sigma_{r,\varphi,z}$	radiale, periphere und axiale Spannungen	d_{am}	Dicke einer amorphen Schicht
τ_D	Deformationszeit	d_{Au}	aufgedampfte Gold-Schichtdicke
τ_S	Relaxationszeit	d_d	Deformationstiefe
Θ	Einfallswinkel der Ionen bezogen auf die Oberflächennormale	d_{MD}	z-Ausdehnung der MD-Zelle
$\tilde{\varepsilon}_{n,e}$	nuklearer (n) und elektronischer (e) Bremsquerschnitt	d_p	Ausdehnung einer porösen Schicht
		e	Elementarladung
		E	kinetische Energie der Ionen

E_B	kinetische Energie der Ionen bei maximalem Energieeintrag	R_p	projizierte Ionenreichweite senkrecht zur Probenoberfläche
E_{elas}	Elastizitätsmodul	r_s	Sputterrate
E_g	Energiebandlücke	S_p	Spur eines Tensors
$F_{G,W}$	Graben- & Wall-Querschnitt	T	Energieübertrag bzw. Probentemperatur
F_I	Tiefenverteilung der implantierten Atome	t	Zeit
G	Schermodul	T^*	effektive Fließtemperatur in EFT-Näherung
g	Elektronen-Phononen-Kopplung	t_{dep}	Depositionszeit bei MD-Simulation
G_∞	Hochfrequenzschermodul der festen amorphen Phase	T_D	Debye-Temperatur
G_a	Parameter für das stimulierte Wachstum von bereits existierenden amorphen Bereichen (Hecking-Modell)	T_{el}	Temperatur im Elektronensystem
m	Überlappingsgrad nach Gibbons	T_{max}	maximal übertragbare Energie
m_e	Masse des Elektrons	T_p	Temperatur im atomaren System
M_F	Masse des Festkörperatoms	T_S	Schmelztemperatur
M_I	Masse des Ions	U	elektrische Spannung
N_I^{am}	Amorphisierungsfluenz	u	atomare Masseneinheit
N_0	atomare Dichte	V	Probenvolumen
n_a	relativer Anteil der Defekte	v	Schergeschwindigkeit
n_{da}	relative Defektkonzentration (aus RBS-Analysen)	v^{TW}	Geschwindigkeit der Temperatur-Wellenfront bei MD-Simulation
N_{displ}	Anzahl deplazierter Gitteratome (berechnet mit SRIM2008)	v_F	Fermi-Geschwindigkeit
n_{dpa}	Anzahl der Deplazierungen pro Gitteratom	v_I	Geschwindigkeit des Ions
N_{I0}	Fluenzschwellwert	v_s	Schallgeschwindigkeit
N_I	Fluenz	Y_{100}	biaxiales Elastizitätsmodul
P_a	Querschnitt für die Erzeugung von Defekten sowie amorphen Bereichen (Hecking-Modell)	z	Weglänge / Tiefe
Q	Ladung	$z_{\varepsilon_n^{max}}$	Tiefe der maximalen nuklearen Energiedeponierung
q	Ladungszustand des Ions	$z_{b,p}$	Tiefe der vergrabenen porösen Schicht
R	Ionenspurradius	Z_F	Ordnungszahl des Festkörperatoms
r_i^{TW}	Position der Temperatur-Wellenfront bei MD-Simulation	Z_I	Ordnungszahl des Ions
R_a	Oberflächenrauigkeit		
R_B	Krümmungsradius der Probe		
r_{dep}	Depositionszylinder bei MD-Simulation		
R_I	Weglänge des Ions im Festkörper		

Anhang

A.1 Experimentelle Bedingungen

In Tabelle A.1 sind die in dieser Arbeit verwendeten Ionen, kinetischen Energien und Einfallswinkel sowie die mittels SRIM2008 [66, 67] ermittelten Werte des nuklearen und elektronischen Energieeintrags zusammen mit der projizierten Reichweite aufgelistet.

Tab. A.1: Experimentelle Bestrahlungsbedingungen (Energie E , Ion mit anfänglichem Ladungszustand q , Masse m und auf die Oberflächennormale bezogener Einfallswinkel Θ) sowie deren berechnete maximale (bei LEI) bzw. über die amorphe Schicht d_{am} gemittelte (bei SHI) nukleare ε_n und elektronische ε_e Energiedeponierung. Zudem ist die projizierte Ionenreichweite R_p und für die LEI-Bestrahlung die Anzahl deplazierter Gitteratome N_{displ}^{max} angegeben.

— LEI-Bestrahlungen —									
E (MeV)	Ion	q	m (u)	v_{Ion}/c (%)	Θ (°)	ε_e^{max} (eV Å ⁻¹)	ε_n^{max}	N_{displ}^{max} (ion ⁻¹ Å ⁻¹)	R_p (nm)
0.19	I	2+	126.9	$\lesssim 0.25$	7	115.0	209.5	11.3	93
0.38	I	1+	126.9	$\lesssim 0.25$	7	115.0	209.5	11.3	93
0.38	Au	1+	197.0	$\lesssim 0.25$	7	158.6	293.1	15.2	70.2
2.5	Ag	3+	107.9	≈ 0.7	7	167.1	138.7	6.9	810
3.0	I	3+	126.9	≈ 0.7	7	201.0	161.3	9.5	835
3.0	I	3+	126.9	≈ 0.7	45	296.6	212.1	10.6	555
9.0	I	4+	126.9	≈ 1.0	7	271.1	120.9	6.4	2700
4.5	Au	2+	197.0	≈ 0.7	7	352.2	261.5	12.9	770
— SHI-Bestrahlungen —									
E (MeV)	Ion	q	m (u)	v_{Ion}/c (%)	Θ (°)	$\bar{\varepsilon}_e$	$\bar{\varepsilon}_n$ (keV nm ⁻¹)	ε_n^{max}	R_p (μm)
89	Au	9+	197.0	≈ 3.1	0	14.0	0.25	1.74	10.5
89	Au	9+	197.0	≈ 3.1	45	18.1	0.40	1.83	7.5
185	Au	13+	197.0	≈ 5.5	0	21.0	0.12	1.62	15.7
185	Au	13+	197.0	≈ 5.5	45	28.3	0.26	1.91	11.0
185	Au	13+	197.0	≈ 5.5	60	38.6	0.34	2.07	8.0
940	Au	34+	197.0	≈ 10	0	33.8	0.03	1.69	38.8

Die entsprechenden experimentellen Bestrahlungsbedingungen (Fluenz N_I , Ionenfluss Φ , Probentemperatur T_{best}) sind in Tabelle A.2 zusammengefasst.

Tab. A.2: Aufgelistet sind die experimentellen Bestrahlungsbedingungen, wobei die angegebenen Werte der Temperatur und des Ionenflusses dem arithmetischen Mittel entsprechen.

Probe	E (MeV)	Ion ^q	Θ (°)	T_{best} (K)	Φ (cm ⁻² s ⁻¹)	N_I (cm ⁻²)
— LEI-Bestrahlungen —						
c-Ge	0.19	I ²⁺	7	RT	6×10^{12}	$1 - 3 \times 10^{16}$
c-, a-Ge	0.38	I ¹⁺	7	RT	$2, 6, 24 \times 10^{12}$	$1 \times 10^{15} - 1 \times 10^{17}$
c-Ge	0.38	Au ¹⁺	7	RT	6×10^{12}	$2 \times 10^{15} - 1 \times 10^{17}$
c-Ge	2.3	Ag ³⁺	7	RT	0.8×10^{12}	$1 \times 10^{15} - 5 \times 10^{16}$
c-, a-Ge	3.0	I ³⁺	7	RT/LNT	$0.9 - 1.3 \times 10^{12}$	$1 \times 10^{11} - 9 \times 10^{16}$
c-, a-Ge	3.0	I ³⁺	45	RT/LNT	$0.9 - 1.3 \times 10^{12}$	$1 \times 10^{11} - 9 \times 10^{16}$
c-Ge,	9.0	I ⁴⁺	7	RT	0.8×10^{12}	$1 \times 10^{15} - 5 \times 10^{16}$
c-, a-Ge	4.5	Au ²⁺	7	RT	$1.0 - 1.4 \times 10^{12}$	$1 \times 10^{15} - 8 \times 10^{16}$
— SHI-Bestrahlungen —						
c-, a-Ge	89	Au ⁹⁺	0	RT	$1.0 - 2.0 \times 10^{10}$	4.5×10^{13}
c-, a-Ge	89	Au ⁹⁺	45	RT	$1.0 - 2.0 \times 10^{10}$	$1 \times 10^{12} - 1.5 \times 10^{14}$
c-, a-Ge	185	Au ¹³⁺	0	RT	$1.0 - 2.0 \times 10^{10}$	$1 \times 10^{12} - 1.5 \times 10^{14}$
c-, a-Ge	185	Au ¹³⁺	45	RT	$1.0 - 2.0 \times 10^{10}$	$1 \times 10^{12} - 1.5 \times 10^{14}$
c-, a-Ge	185	Au ¹³⁺	60	RT	$1.0 - 2.0 \times 10^{10}$	$1 \times 10^{12} - 1.5 \times 10^{14}$
c-, a-Ge	940	Au ³⁴⁺	0	RT/TT	$0.6 - 6.0 \times 10^9$	$2 \times 10^{11} - 2.3 \times 10^{13}$

A.2 Analyseverfahren

Die systematische Untersuchung der bestrahlten Proben (c-Ge, a-Ge, p-Ge (poröses Germanium)) erfolgte ex-situ unter Verwendung verschiedener komplementärer Analyseverfahren, die im Folgenden vorgestellt werden.

Für die Untersuchungen zur ionenstrahlinduzierten Schädigung und Amorphisierung von c-Ge sowie für die Bestimmung der amorphen Schichtdicke d_{am} wurden am 3 MV Beschleuniger des IFK **Rutherford-Weitwinkelstreuung** (RBS [1–3]) mit 2.0 MeV He⁺-Ionen unter einem Rückstreuwinkel von 170° bei einer gemessenen Gesamtladung von 10 μ C vorgenommen. Bei diesen Parametern beträgt die erreichte Tiefenaufösung für die in Kanalisierungsrichtung (RBS/C, (001)-Kanalisierung) und in Zufallsrichtung (Probe 7° verkippt zur (001)-Achse bei zusätzlicher Rotation um die (001)-Achse) durchgeführten Messungen ≈ 10 nm. Basierend auf den gemessenen RBS-Spektren kann die relative Konzentration deplazierter Gitteratome $n_{da}(z)$ als Funktion

der Tiefe z mittels des auf dem diskontinuierlichen Modell der Dekanalisation beruhenden Programms *DICADA* (Dechanneling of Ions in Crystals And Defect Analysis [2, 239]) berechnet werden. Dabei wird n_{da} als relative Defektkonzentration bezeichnet, wobei $n_{da} = 0$ einem perfekten Kristall und $n_{da} = 1$ einem amorphen Material entspricht. Weitere Untersuchungen zur atomaren Struktur der bestrahlten Proben, speziell von p-Ge, erfolgten durch **Raman-Spektroskopie** (RS, Anregungswellenlänge $\lambda_{RS} = 633$ nm) am Astrophysikalischen Institut (AIU) der FSU Jena. Die durch optische Phononen im Gitter induzierte Stokes-Verschiebung wurde an verschiedenen Proben abhängig von der bestrahlten Fluenz gemessen und erlaubt Rückschlüsse über die ionenstrahlinduzierte Änderung der Bindungswinkel sowie dem strukturellen atomaren Aufbau (Kristallqualität). Die Analyse der vertikalen Volumenausdehnung bestrahlter Proben relativ zu den unbestrahlten Referenzbereichen wurde mittels **Oberflächenprofilometrie** am IFK (*Sloan DEKTAK 3030ST*) und am EME (*DEKTAK TENCOR alpha-step 200*) gemessen, wobei beide Profilometer eine vertikale Auflösung von einigen nm erreichen. Zudem konnten unter Verwendung eines **Rasterkraftmikroskops** (AFM) vom Typ *VEECO MultiMode AFM* die fluenzabhängig bestrahlten Probenbereiche mit einer Sub-Nanometer Auflösung charakterisiert werden. Im Vergleich zu den unbestrahlten Referenzbereichen wurden die bestrahlten Probenoberflächen zudem mit einem **Lichtmikroskop** (*Leica DM 4000 M*, inklusive Digitalkamera) beobachtet, während hochauflösende Untersuchungen der strukturellen Modifikationen mit **Rasterelektronenmikroskopie** (SEM) und **Transmissionselektronenmikroskopie** (TEM) durchgeführt wurden. Die SEM-Analysen erfolgten in unterschiedlich orientierten Geometrien (Querschnitt (cs-SEM) sowie Draufsicht (pv-SEM)) am Otto-Schott-Institut für Glaschemie (OSI) der FSU Jena mit einem *JEOL 7001F SEM* und am EME mit einem *Zeiss UltraPlus analytical FESEM* bei typischen Beschleunigungsspannungen von 10 kV. Für die Präparation der Querschnittsproben der TEM-Untersuchungen (cs-TEM) wurden am IFK ausgewählte Proben nach konventioneller Standardpräparation [240] mechanisch auf $(30 \dots 40) \mu\text{m}$ abgeschliffen und poliert, gefolgt von einer weiteren Ausdünnung durch Ar-Ionenätzen auf durchstrahlbare Probenstücken von $d_{TEM} < 100$ nm. Die Analysen wurden am Institut für Materialwissenschaft und Werkstofftechnologie (IMT) der FSU Jena mit einem mit einer *LaB6* Kathode ausgerüsteten *JEOL JEM-3010 TEM* durchgeführt, welches bei der verwendeten Beschleunigungsspannung von 300 kV eine Punktauflösung von 0.17 nm (Linienauflösung 0.14 nm) erreicht. Beide Elektronenmikroskope (SEM und TEM) der FSU Jena verfügen über die Möglichkeit der **energiedispersiven Röntgenspektroskopie** (EDX) zur stöchiometrischen Analyse der bestrahlten Proben.

A.3 Molekulardynamische Simulation

Die vorgenommenen MD-Simulationen [208] basieren auf einem Standard MD-Code, in dem die Integration von N Bewegungsgleichungen durch die Geschwindigkeitsform des Verlet Algorithmus [241] erfolgt. Die einzelnen Zeitschritte der Simulation werden bestimmt durch die Geschwindigkeit der schnellsten Atome, betragen aber maximal 0.5 fs. Das verwendete Potential vom Stillinger-Weber-Typ [242] wurde für kleine atomare Abstände durch ein realistischeres repulsives Potential [243] erweitert, welches auf einer statistischen Beschreibung des Atoms basiert und eine Superposition der elektronischen Ladungsverteilungen zugrunde legt. Die verwendeten Parameter für Ge sind aus [244] entnommen, wobei eine generierte MD-Zelle der Dimension $85.8 \text{ \AA} \times 85.8 \text{ \AA} \times 26.6 \text{ \AA}$ (Massendichte 5.147 g cm^{-3}) 9000 Atome enthält. Entsprechend der Zellgröße ist die Simulation begrenzt auf die Formierung von kleinen Hohlräumen und folglich fokussiert auf die Untersuchung des Anfangsstadiums und des zugrunde liegenden Mechanismus der Ionenstrahlinduzierten Hohlraumformierung. Die Erzeugung einer amorphen MD-Zelle erfolgte durch die Simulation der Ionenbestrahlung einer c-Ge MD-Zelle, ähnlich dem vorgeschlagenen Prozess von Weber [245].

Die Energiedeponierung (Simulation der SHI-Bestrahlung) erfolgte entlang der z-Richtung der MD-Zelle ($\Theta = 0^\circ$) in einem um die Ionenspur zylinderförmigen Bereich, welcher durch die Position (x_0, y_0) und den Radius $r_{dep} = 20 \text{ \AA}$ definiert ist [246]. Die gesamte in diesem Bereich auf die Atome übertragene Energie beträgt $\Delta E_{kin} = d_{MD} \varepsilon_{MD}$ mit $\varepsilon_{MD} = g \varepsilon_e$, wobei d_{MD} der z-Ausdehnung der MD-Zelle entspricht und $g < 1$ als freier Parameter behandelt wird. Innerhalb einer charakteristischen Zeit für den Energietransfer vom Elektronen- zum atomaren System von $t_{dep} = 1 \text{ ps}$ [247] wird die zusätzlich eingebrachte Energie ΔE_{kin} äquidistant auf alle Atome im Bereich $r_{dep} \leq 20 \text{ \AA}$ aufgeteilt, während die Richtung des übertragenen Impulses statistisch erfolgt. Nach abgeschlossener Energiedeponierung wird die Entwicklung des Systems mit periodischen Randbedingungen für alle drei Raumdimensionen simuliert. Der Druck wurde während des gesamten Prozesses bei Null gehalten und die Simulation erlaubt, entsprechend der experimentellen Ergebnisse, eine Expansion der Zelle ausschließlich in z-Richtung. Die infolge der Energiedeponierung induzierte Wärme wird durch eine Geschwindigkeitsskalierung aller Atome außerhalb eines coaxial zum Depositionszylinder orientierten Zylinders mit einem Radius r_{scal} abgeführt ($r_{dep} < r_{scal} = 0.3 \times \text{x-y-Diagonale der Zelle}$), so dass nach maximal 100 ps wieder die Ausgangstemperatur erreicht wird. Eine fluenzabhängige SHI-Bestrahlung wird durch eine Serie von Ionen in Zeitintervallen von 100 ps an stochastisch bestimmten Positionen (x_0, y_0) realisiert. Die Simulationen wurden für unterschiedliche Zellgrößen und für verschiedene Radien r_{dep} durchgeführt, wobei die deponierte Energie ε_{MD} und die Probertemperatur variiert wurden [208].

Danksagung

Dieses abschließende Kapitel ist all jenen gewidmet, die mich - direkt oder indirekt - während der Promotion unterstützt und somit maßgeblich zur Realisierung der vorliegenden Dissertation beigetragen haben.

Besonderen Dank möchte ich Prof. Dr. Werner Wesch (IFK, FSU Jena) für sein entgegengebrachtes Vertrauen, seine hervorragende Betreuung und für die ausgezeichneten Arbeitsbedingungen sowie die freundliche und konstruktive Atmosphäre in seiner Arbeitsgruppe aussprechen. Ihre tatkräftige Unterstützung bei der Durchführung der Experimente, Ihre wertvollen Ideen und hilfreichen Hinweise sowie die gute Zusammenarbeit haben maßgeblich zum Gelingen meiner Promotion beigetragen. Bedanken möchte ich mich zudem für die Möglichkeit der Durchführung von Experimenten an diversen Forschungseinrichtungen und Universitäten weltweit, sowie dem Vertrauen zur Präsentation unserer erzielten Ergebnisse auf mehreren nationalen und internationalen Tagungen, Workshops und Konferenzen.

Ich danke Dr. Claudia Schnohr (EME, ANU Canberra / IFK, FSU Jena) für die sehr angenehme fachliche Zusammenarbeit und die Vielzahl von anregenden und lehrreichen Diskussionen. Ganz besonders herzlichen Dank gilt Ihrer vielseitigen experimentellen und kulturellen Betreuung während meines Aufenthalts an der ANU.

Herzlichen Dank möchte ich PD Dr. Konrad Gärtner (IFK, FSU Jena) und Dipl.-Phys. Julius Jöhrens (ehemals IFK, FSU Jena, aktuell IFEU, Heidelberg) für ihre kompetenten Diskussionen und die exzellenten Ergebnisse der MD-Simulationen aussprechen.

Für die stets hilfsbereite, freundliche Zusammenarbeit und fachlich kreative Arbeitsatmosphäre möchte ich mich bei meinen Kollegen PD Dr. Elke Wendler (IFK, FSU Jena), Dipl.-Phys. Thomas Bierschenk (ehemals IFK, FSU Jena, aktuell EME, ANU Canberra) und Dipl.-Phys. Willem Rischau (ehemals IFK, FSU Jena, aktuell LPEM, ESPCI Paris Tech) bedanken. Zudem danke ich meinen engagierten Diplomanden Dipl.-Phys. Jan Wernecke (ehemals IFK, FSU Jena, aktuell PTB, Berlin) und Dipl.-Phys. Carolin Jacobi (ehemals IFK, FSU Jena, aktuell IA, RWTH Aachen) für die gute Zusammen-

arbeit, konstruktive Ideen und Diskussionen sowie die experimentellen Ergebnissen.

Weiterhin danke ich Dr. Mark Ridgway (EME, ANU Canberra) für die exzellente Kooperation, für seine freundliche Unterstützung und die sehr erfolgreiche fachliche Zusammenarbeit. Einen großen Dank an alle Gruppenmitglieder (Dr. Patrick Kluth, Dr. Raquel Giulian, Dr. Leandro Araujo, Dr. David Sprouster) für die experimentelle Betreuung während der Strahlzeiten an der ANU.

Besonderer Dank für Ihre ambitionierte Unterstützung bei der Durchführung unzähliger Bestrahlungen gilt Herrn Ulrich Barth und Herrn Gerald Lenk (beide IFK, FSU Jena). Bedanken möchte ich mich zudem bei Herrn Ulrich Barth für die Unterstützung bei den RBS-Analysen und für die zahlreichen konstruktiven Ideen und Hinweisen. Frau Carmen Voigt (IFK, FSU Jena) danke ich herzlich für die geduldige und ausdauernde Probenpräparation sowie die unermüdlichen Literatur-Recherchen. Für den stets kompetenten und fachlichen Beistand bei diversen technischen sowie elektronischen Problemen möchte ich Herrn Frank Jehn (IFK, FSU Jena) danken.

Weiterhin danke ich Dr. Andre Undiz (IMT, FSU Jena) und Dr. Günter Völksch (OSI, FSU Jena) für Ihre Zusammenarbeit und Hilfe bei den TEM- bzw. SEM-Analysen.

Für die ambitionierte experimentelle Betreuung während der Strahlzeiten an der GSI danke ich Dr. Daniel Severin und Dr. Markus Bender.

Ich danke weiterhin der Mechanik-Werkstatt der FSU Jena unter der Leitung von Peter Hanse für die Konstruktion einer Vielzahl mechanischer Bauteile bis hin zur Anfertigung kompletter Targethalterungen.

Bedanken möchte ich mich darüber hinaus für die finanzielle Förderung dieser Forschung durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF, Förderungsnummer 05KK7SJ1) und den Deutschen Akademischen Austausch Dienst (DAAD, Förderungsnummer D/07/15034).

Ein ganz besonders herzlicher Dank gebührt meiner Mutter Sigrid Steinbach, die mich in jeder Hinsicht und zu jeder Zeit unterstützt hat und mir somit die notwendige Ruhe, Ausdauer und Sicherheit für die Durchführung dieser Arbeit vermittelt.

Schließlich danke ich meiner Freundin Anna Grohmann für ihre liebevolle und vor allem geduldige Unterstützung sowie das entgegengebrachte Vertrauen, das ich zu jeder Zeit erfahren habe. Für Ihre persistenten Ermunterungen und aufopferungsvolle aktive sowie passive Unterstützung danke ich ihr von ganzem Herzen. Bedanken möchte ich mich auch bei der gesamten Familie Grohmann für ihre Unterstützung und die Obhut meiner Kätzchen.

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich erkläre hiermit ehrenwörtlich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel und Literatur angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Weitere Personen waren nicht an der inhaltlich-materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder andere Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für die Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Die geltende Prüfungsordnung der Physikalisch-Astronomischen Fakultät ist mir bekannt.

Ich versichere ehrenwörtlich, dass ich nach bestem Wissen die reine Wahrheit gesagt und nichts verschwiegen habe.

Jena, den 22. Mai 2012

.....

Tobias Steinbach